

**THEORIE DER KRITISCHEN RÖNTGEN-
UND NEUTRONENSTREUUNG AN OBERFLÄCHEN**

GERHARD GOMPPER

Theorie der kritischen Röntgen- und Neutronenstreuung
an Oberflächen

Dissertation
der Fakultät für Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von

GERHARD GOMPPER

aus Stuttgart

München, den 7. Mai 1986

1. Gutachter : Prof. Dr. H. Wagner

2. Gutachter : Prof. Dr. J. Peisl

Tag der mündlichen Prüfung : 28. Juni 1986

Inhalt :

	Seite
Inhaltsangabe	5
1. Einführung	6
2. Kritische Phänomene in halbinendlichen Systemen	9
1. Theorie	
2. Experiment	
3. Der Streuquerschnitt für die kritische Röntgenstreuung unter Totalreflexion	24
4. Diffuse Streuung : Korrelationsfunktion für $T \geq T_c$	39
1. Exakte Ergebnisse	
2. ϵ -Entwicklung	
3. Diskussion der diffusen Streuintensität	
5. Bragg Streuung : Ordnungsparameterprofil für $T < T_c$	87
1. Das Ordnungsparameterprofil	
2. Der Überstruktureflex am "gewöhnlichen" Übergang	
6. Ergänzungen und Ausblick	100
1. Kritische Dynamik	
2. Der Rauigkeitsübergang	
3. Oberflächenschmelzen	
7. Zusammenfassung	118
Anhang	122
Literaturverzeichnis	124

Inhaltsangabe

Bei einem kontinuierlichen Phasenübergang im Volumen führen die kritischen Fluktuationen des Ordnungsparameters in der Nähe von Oberflächen zu Singularitäten im Wirkungsquerschnitt totalreflektierter Röntgenstrahlen. Ziel dieser Arbeit ist eine detaillierte Untersuchung dieses Streuquerschnitts im Hinblick auf die experimentelle Bestimmung von kritischen Oberflächenexponenten, von Skalenfunktionen und von universellen Amplitudenverhältnissen. Dazu wird das asymptotische Verhalten der Temperatur- und Winkelabhängigkeit der Streuintensität mit Hilfe der feldtheoretischen Renormierung berechnet. Besonderes Gewicht wird dabei auf die Untersuchung der Korrekturterme gelegt, die für eine Abschätzung der asymptotischen kritischen Bereiche und eine Optimierung des Experiments benötigt werden.

Es wird ferner gezeigt, daß die Konforminvarianz der Fluktuationen am kritischen Punkt exakte Aussagen über einige Korrekturterme zuläßt, die über die übliche Renormierungsgruppentheorie hinausgehen.

Die Untersuchung anderer kooperativer Phänomene an Oberflächen - Rauigkeitsübergang und Oberflächenschmelzen - mit Hilfe der Röntgen- und Neutronenstreuung unter Totalreflexion wird ebenfalls diskutiert.

1. Einleitung

Der Einfluß von Oberflächen auf kontinuierliche Phasenübergänge im Volumen war in den letzten Jahren der Gegenstand vieler theoretischer Untersuchungen. Als Ergebnis dieser Arbeiten hat sich inzwischen ein detailliertes und relativ abgerundetes Bild des oberflächennahen kritischen Verhaltens ergeben (Binder, 1983). Die theoretischen Vorhersagen reichen dabei von Skalenrelationen und Zahlenwerten für Oberflächenexponenten bis hin zu Skalenfunktionen und universellen Amplitudenverhältnissen. Bisher warten allerdings die meisten dieser Ergebnisse auf eine experimentelle Überprüfung.

Es wurde von verschiedenen Autoren (Lu und Rice, 1978; Marra et al., 1979) festgestellt, daß die Röntgen- und Neutronenstreuung, die sich bei der Untersuchung von Volumeneigenschaften so hervorragend bewährt hat, unter den Bedingungen der Totalreflexion auch für die Untersuchung von Oberflächeneigenschaften verwendet werden kann[†]. Dem liegt folgende Idee zugrunde: Der Brechungsindex eines Festkörpers ist im Röntgenbereich (geringfügig) kleiner als der des Vakuums, so daß externe Totalreflexion möglich ist. Ist der Einfallswinkel α_i kleiner als der kritische Winkel α_c , dann entsteht in der Probe eine exponentiell gedämpfte

[†] Neuere experimentelle Arbeiten sind: Eisenberger und Marra, 1981; Felcher, 1981; Marra et al., 1982; Felcher et al., 1984; Nielsen, 1985; Dosch et al., 1986.

Standwelle. Deren Streuung an oberflächennahen Inhomogenitäten ist dementsprechend auf eine Schicht von der Dicke der Eindringtiefe beschränkt. Es zeigt sich, daß die van-Hove Formel für den Wirkungsquerschnitt bei der Volumenstreuung auf die Streuung unter Totalreflexion verallgemeinert werden kann (Dietrich, 1982; Mazur und Mills, 1982; Vineyard, 1982; Dietrich und Wagner, 1983, 1984, 1985). Die Vorteile der Röntgen- und Neutronenstreuung im Volumen übertragen sich dabei auf die Oberflächenstreuung.

Die Anwendung der Totalreflexionsstreuung zur Untersuchung der kritischen Oberflächenphänomene wurde erstmals von Dietrich und Wagner (1983) vorgeschlagen. Die kritischen Fluktuationen des Ordnungsparameters in der Nähe der Oberfläche führen in der diffusen Streuintensität zu einer Singularität, deren asymptotische Temperatur- und Winkelabhängigkeit durch verschiedene Oberflächenexponenten beschrieben wird. Das singuläre Verhalten des Wirkungsquerschnitts bei Totalreflexion ist allerdings im Vergleich zur kritischen Volumenstreuung relativ schwach : Die Streuintensität divergiert nicht, sondern besitzt lediglich eine Intensitätsspitze (cusp)[†].

Das asymptotische kritische Verhalten, welches Informationen über Oberflächenexponenten liefert, ist nur in einem begrenzten Temperatur- und Winkelbereich gültig. Außerhalb dieses Bereiches findet man eine kompliziertere Temperatur- und Winkelabhängigkeit. Die experimentelle Bestimmung von kritischen Exponenten setzt vor-

[†] Einen Überblick gibt Dietrich (1986).

aus, daß die Grenzen des jeweiligen "kritischen" Bereiches ungefähr bekannt sind. Das Ideal des Experimentators in dieser Hinsicht wurde von Debye (1965) sehr deutlich zum Ausdruck gebracht: "I would like the theoretical people to tell me when I am so and so far away from the critical point my curve should look so and so." Ein Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Berechnung von Korrekturtermen zum führenden kritischen Verhalten, mit deren Hilfe eine Abschätzung dieser Grenzen möglich ist. Die Kenntnis dieser Korrekturen erlaubt außerdem den Vergleich von theoretischen und experimentellen Ergebnissen auch außerhalb des asymptotischen kritischen Bereichs.

Bei der Untersuchung der kritischen Oberflächenphänomene hat man außer den auch bei den kritischen Phänomenen im Volumen auftretenden Korrekturen einen zusätzlichen Beitrag : Die Eindringtiefe liefert eine weitere Längenskala, die klein gegenüber allen anderen Längenskalen sein muß, wenn das reine Oberflächenverhalten beobachtet werden soll. Der Beitrag einer endlichen Eindringtiefe liefert den führenden Korrekturterm zum asymptotischen Verhalten. Es ist daher hier besonders schwierig, den asymptotischen kritischen Bereich zu erreichen.

2. Kritische Phänomene in halbunendlichen Systemen[†]

2.1 Theorie

Das einfachste mikroskopische Modell für die Beschreibung kritischer Phänomene in der Nähe von Oberflächen ist das Ising-Modell. Es besteht aus einem d-dimensionalen kubischen Gitter im Halbraum $z \geq 0$, bei dem sich an jedem Gitterplatz i ein Ising-Spin s_i befindet; diese Spins wechselwirken mit einer nächsten-Nachbar-Kopplung J . An der Oberfläche können natürlich die Wechselwirkungen zwischen den Spins anders sein als im Volumen. Dies wird durch geänderte Kopplungskonstanten in der 1. Schicht ($J_{\parallel}$) und zwischen 1. und 2. Schicht ($J_{\perp}$) berücksichtigt (siehe Fig. 2.1).

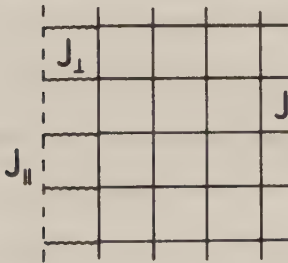


Fig. 2.1: Das halb-
unendliche
Ising-Modell

[†] Ein Überblick über die theoretischen Methoden und Ergebnisse sowie eine umfassende Liste von Referenzen ist zu finden in: Diehl(1980), Binder(1983), Wagner(1984), Diehl und Dietrich (1985), Diehl(1985).

Die Konfigurationsenergie für ein solches System in einem Magnetfeld H lautet

$$- \beta \mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} K_{ij} \underline{s}_i \underline{s}_j + \frac{h}{\beta} \sum_i \underline{s}_i + \frac{h_1}{\beta} \sum_i \underline{s}_i, \quad (2.1)$$

1. Schicht

wobei der Temperaturfaktor $\beta = 1/(k_B T)$ bereits in die Kopplungskonstanten $K_{ij} = \beta J_{ij}$ und in $h = \beta H$ absorbiert wurde. Zusätzlich wurde ein Magnetfeld in der 1. Schicht eingeführt. $\langle ij \rangle$ bezeichnet die Summation über nächste Nachbarn. Der Übergang zur Kontinuumsbeschreibung führt zum Standard-Modell für die feldtheoretische Beschreibung halibunendlicher Systeme :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\{\phi\} = & \int_0^\infty dz \int d^{d-1}r \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{\tau}{2} \phi^2 + \frac{g}{4!} (\phi^2)^2 + h \phi \right\} \\ & + \int d^{d-1}r \left[\frac{c_0}{2} \phi^2 + h_1 \phi \right]_{z=0} \end{aligned} \quad (2.2)$$

mit dem n -komponentigen Ordnungsparameterfeld $\phi(\underline{r}, z)$; $\underline{r}$ bzw. z bezeichnet die Koordinaten parallel bzw. senkrecht zur Oberfläche. Die Konstante c_0 kann durch die Kopplungen $J_{\parallel}$, $J_{\perp}$ ausgedrückt werden :

$$c_0 = \frac{1}{a} \left[1 - \frac{(J_{\perp}/J - 1) + 2(d-1)(J_{\parallel}/J - 1)}{J_{\perp}/J} \right] \quad (2.3)$$

mit der Gitterkonstanten a .

Fig. 2.2 zeigt das Phasendiagramm in Molekularfeld (MF)-Näherung für $h = h_1 = 0$. Man findet 4 verschiedene Arten von Phasenübergängen :

- (i) Den Oberflächenübergang ("surface transition"), bei dem die Oberflächenkopplungen so stark erhöht sind, daß die Oberfläche bei einer Temperatur T_c^s oberhalb der kritischen Temperatur T_c^b des Volumens ordnet. Man erwartet für diesen Übergang die kritischen Eigenschaften des $(d-1)$ -dimensionalen Volumens.

Alle anderen Übergänge finden bei T_c^b statt:

- (ii) Der gewöhnliche Übergang ("ordinary transition"), bei dem die Oberflächenordnung von der Ordnung des Volumens getrieben wird.
- (iii) Der außergewöhnliche Übergang ("extraordinary transition"), bei dem die Volumenordnung in Anwesenheit einer bereits geordneten Oberfläche stattfindet.
- (iv) Der spezielle Übergang ("special transition"), bei dem die Linien der anderen Phasenübergänge zusammentreffen. Es handelt sich daher um einen multikritischen Punkt.

Im Folgenden werden ausschließlich "gewöhnlicher" und "spezieller" Übergang betrachtet.

Zur Beschreibung der kritischen Oberflächeneigenschaften wird eine Reihe von Exponenten für Oberflächengrößen wie die Oberflächenmagnetisierung m_1 und die Suszeptibilitäten χ_1 , χ_{11} eingeführt :

$$m_1 = \langle \phi(r, z=0) \rangle \sim |t|^{\beta_1} \quad h=h_1=0, t \rightarrow 0^- \quad (2.4)$$

$$\sim h^{1/\delta_1} \quad h_1=t=0, h \rightarrow 0^+$$

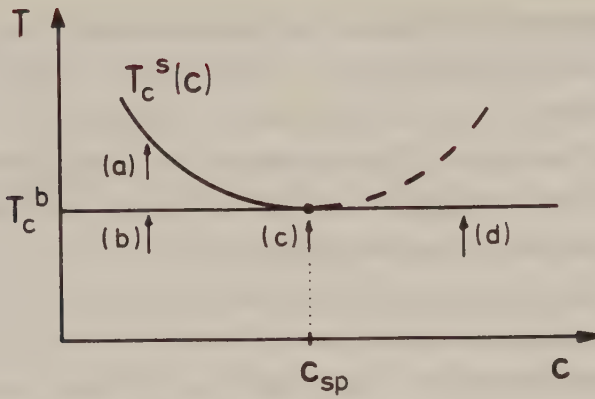


Fig. 2.2: Phasendiagramm

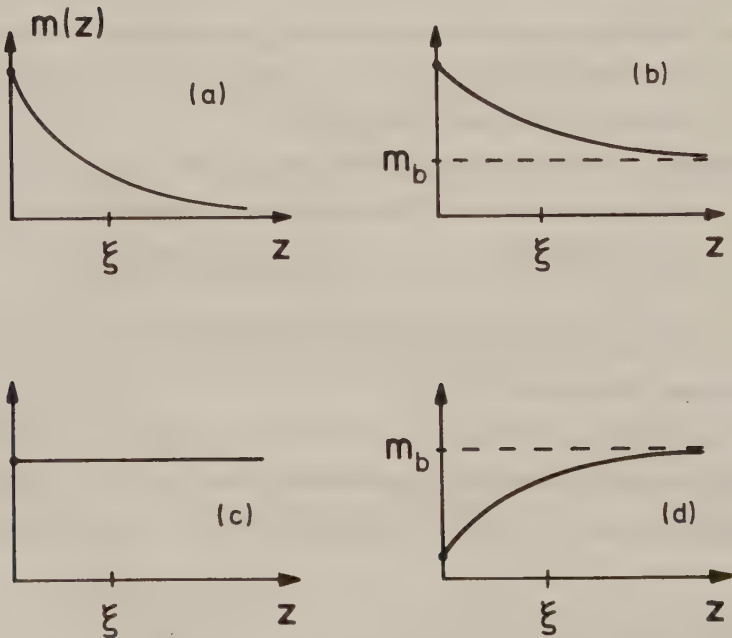


Fig. 2.3: Ordnungsparameterprofile für die verschiedenen Übergänge in Fig.2.2. Im Fall (a) bleibt die Korrelationslänge senkrecht zur Oberfläche endlich.

$$\chi_{11} = \left. \frac{\partial m_1}{\partial h_1} \right|_{h_1=h=0} = \chi_{11}^{(\pm)} |t|^{-\gamma_{11}} \quad t \rightarrow 0 \quad (2.5)$$

$$\chi_1 = \left. \frac{\partial m_1}{\partial h} \right|_{h_1=h=0} = \chi_1^{(\pm)} |t|^{-\gamma_1} \quad t \rightarrow 0 ; \quad (2.6)$$

t bezeichnet die reduzierte Temperatur $t=(T-T_c)/T_c$.

In der Nähe der Oberfläche werden Ordnungsparameter (OP) und Korrelationsfunktionen inhomogen. So wird zum Beispiel der Ordnungsparameter m eine Funktion des Abstandes z zur Oberfläche. Die OP-Profile, die man in MF-Theorie erhält und die den Punkten (a) bis (d) in Fig. 2.2 entsprechen, sind in Fig. 2.3 dargestellt.

Ein globales Maß für die Inhomogenität der Magnetisierung ist die Überschuß-Magnetisierung m_s , die die Abweichung des Profils vom Volumenwert m_b angibt:

$$m_s = \int_0^\infty dz [m(z) - m_b] = m_s^{(-)} |t|^{\beta_s} \quad (2.7)$$

und die damit verbundene Überschuß-Suszeptibilität

$$\chi_s = \left. \frac{\partial m_s}{\partial h} \right|_{h=0} = \chi_s^{(\pm)} |t|^{-\gamma_s} \quad (2.8)$$

Für die Oberflächenstreuung besonders wichtig ist die Zweipunkt-Korrelationsfunktion

$$G(r, z_1, z_2) = \langle \phi(\underline{r}_1, z_1) \phi(\underline{r}_2, z_2) \rangle - \langle \phi(\underline{r}_1, z_1) \rangle \langle \phi(\underline{r}_2, z_2) \rangle \quad (2.9)$$

wobei $r = |\underline{r}_1 - \underline{r}_2|$ den Abstand parallel zur Oberfläche angibt (siehe Fig. 2.4). Wegen der gebrochenen Translationsinvarianz sind zwei Exponenten notwendig, um den Zerfall der Korrelationen bei T_C zu beschreiben:

$$G(r, z_1, z_2) \sim \begin{cases} r^{-(d-2+\eta_{\parallel})} & r \rightarrow \infty, z_1, z_2 \text{ fest} \\ |z_1 - z_2|^{-(d-2+\eta_{\perp})} & r \text{ fest}, |z_1 - z_2| \rightarrow \infty \end{cases} \quad \begin{matrix} (2.10) \\ (2.11) \end{matrix}$$

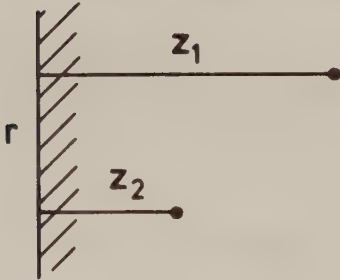


Fig. 2.4 : Korrelationsfunktion

Die Renormierungsgruppentheorie für die halbusendlichen Systeme ergibt

- (i) Die Korrelationsfunktion und das Ordnungsparameterprofil besitzen in der Nähe des kritischen Punktes Skalenform :

$$m(z; t, h, h_1) = |t|^\beta f(z/\xi, h|t|^{-\Delta}, h_1|t|^{-\Delta_1}) \quad (2.12)$$

$$G(r, z_1, z_2, t) = r^{-(d-2+\eta)} \Xi(r/\xi, z_1/r, z_2/r) \quad (2.13)$$

Hier bezeichnen β, Δ und η die üblichen Volumenexponenten und $\xi = \xi_0^{(\pm)} |t|^{-\nu}$ die Bulk-Korrelationslänge.

Der Vergleich von (2.12) und (2.4) zeigt, daß sich die Skalenfunktion $f(x, 0, 0)$ für $x \rightarrow 0$ verhalten muß wie

$$f(x, 0, 0) \sim x^{(\beta_1 - \beta)/\nu} \quad (2.14)$$

um das richtige Temperaturverhalten an der Oberfläche zu erhalten.

Ebenso findet man

$$\begin{aligned} \Xi(0, x, x') &\sim x^{\eta_{\parallel} - \eta} \quad \text{für } x = x' \rightarrow 0 \\ &\sim x^{\eta_{\perp} - \eta} \quad \text{für } x' \text{ fest, } x \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (2.15)$$

- (ii) Es gibt am "gewöhnlichen Übergang" einen unabhängigen Oberflächenexponenten (Diehl und Dietrich, 1980, 1981a), die anderen können durch Skalenrelationen erhalten werden:

$$\begin{aligned} \gamma_s &= \gamma + \nu & \beta_s &= \beta - \nu \\ \gamma_{11} &= \nu(1 - \eta_{\parallel}) & \gamma_1 &= \nu(2 - \eta_{\perp}) \\ \beta_1 &= \frac{\nu}{2}(d - 2 + \eta_{\parallel}) & \delta_1 &= 1 + \gamma_1 / \beta_1 \\ 2\eta_{\perp} &= \eta + \eta_{\parallel} & 2\gamma_1 &= \gamma_{11} + \gamma_s \\ \Delta_1 &= \frac{\nu}{2}(d - \eta_{\parallel}) \end{aligned} \quad (2.16)$$

In der ϵ -Entwicklung in $d=4-\epsilon$ Dimensionen ergibt sich z.B. der folgende Zahlenwert für $\eta_{\parallel}^{\text{ord}}$ (Diehl und Dietrich, 1980, 1981a; Reeve und Guttman, 1980)

$$\eta_{\parallel}^{\text{ord}} = 2 - \frac{n+2}{n+8} \epsilon + \frac{(n+2)(17n+76)}{2(n+8)^3} \epsilon^2 + O(\epsilon^3) \quad (2.17)$$

Die Oberflächenexponenten wurden auch in einer $1/n$ - Entwicklung einschließlich $O(1/n)$ berechnet (Ohno und Okabe, 1983a,b); eine Extrapolation nach $n \leq 3$ ergibt jedoch Zahlenwerte, die relativ weit von denen anderer Methoden (vergl. Tabelle 2.1) entfernt sind.

- (iii) Es gibt am "speziellen Übergang" zwei unabhängige Oberflächenexponenten, zusätzlich zu $\eta_{\parallel}$ den Crossover-Exponenten ϕ_s (Diehl und Dietrich, 1981b, 1983). Die ϵ -Entwicklung ergibt:

$$\eta_{\parallel}^{\text{sp}} = - \frac{n+2}{n+8} \epsilon - \frac{5(n+2)(n-4)}{2(n+8)^3} \epsilon^2 + O(\epsilon^3) \quad (2.18a)$$

$$\phi_s = \frac{1}{2} - \frac{n+2}{4(n+8)} \epsilon + \frac{(n+2)}{8(n+8)^3} [8\pi^2(n+8) - (n^2+35n+156)] \epsilon^2 + O(\epsilon^3) \quad (2.18b)$$

(Diehl und Dietrich, 1981b, 1983).

Der Crossoverexponent beschreibt physikalisch die Abhängigkeit der kritischen Temperatur T_c^s des Oberflächenübergangs in der Nähe des multikritischen Punktes ($c=c_{\text{sp}}$) als Funktion von c für $c < c_{\text{sp}}$ (siehe Fig. 2.2):

$$(T_c^s(c) - T_c^b)/T_c^b \sim |c - c_{sp}|^{1/\phi_s} \quad (2.19)$$

Dieselbe Gleichung (mit T anstelle von T_c^s) beschreibt für $c > c_{sp}$ die Grenze zwischen den beiden Gebieten im Phasendiagramm, in denen das "gewöhnliche" bzw. das "spezielle" kritische Verhalten zu beobachten ist (gestrichelte Linie in Fig. 2.2).

Man beachte, daß in $d=3$ ein Oberflächenübergang und damit auch der multikritische Punkt nur für $n=1$ existieren kann. Dies zeigt sich explizit in der $1/n$ - Entwicklung (Ohno und Okabe, 1983b,c): Der "spezielle" Übergang existiert dort nur für $d > 3$.

iv) Universelle Amplitudenverhältnisse:

Zu jedem relevanten Skalenfeld (t, h und h_1 am "gewöhnlichen" Übergang, zusätzlich c am "speziellen") gehört außer einem unabhängigen kritischen Exponenten auch ein unabhängiger nicht-universeller Skalenfaktor. Alle nicht-universellen Amplituden können durch diese Skalenfaktoren ausgedrückt werden. Verhältnisse von Amplituden, bei denen diese Skalenfaktoren wegfallen, sind daher universell, z.B.

$$[\chi_s^{(\pm)} \chi_{11}^{(\pm)} (\chi_1^{(\pm)})^{-2}]_{sp, ord} \quad (2.20)$$

Insbesondere sind die Verhältnisse der Amplituden der verallgemeinerten Suszeptibilitäten (2.5), (2.6) und (2.8)

oberhalb und unterhalb T_c universell, wie z.B.

$$[\chi_{11}^{(+)} / \chi_{11}^{(-)}]_{sp,ord} , \quad (2.21)$$

$$\text{sowie} \quad [\chi_s^{(\pm)} / (\chi_b^{(\pm)} \xi_o^{(\pm)})]_{sp,ord} \quad (2.22)$$

$$\text{und} \quad [m_s^{(-)} / (m_b^{(-)} \xi_o^{(-)})]_{sp,ord} \quad (2.23)$$

(Okabe und Ohno, 1984; Diehl et al., 1985).

- v) Man kann das Modell (2.2) für den Fall von Oberflächen-anisotropien verallgemeinern, indem man $c_o \phi^2$ durch

$$\sum_{\alpha=1}^n c_{\alpha} \phi_{\alpha}^2$$

ersetzt. Vom experimentellen Standpunkt sind vor allem Systeme von Interesse, bei denen die Ausrichtung der Oberflächenspins in einer Richtung bevorzugt ist (easy axis); dann besteht nämlich auch für $n \geq 2$ in $d=3$ die Möglichkeit für einen "anisotropen speziellen" Übergang. Dieser Übergang gehört allerdings zu einer anderen Universalitätsklasse wie der isotrope spezielle Übergang und besitzt dementsprechend andere Oberflächenexponenten (Diehl und Eisenriegler, 1984a,b; Ohno et al., 1985).

Am "gewöhnlichen" Übergang sind Oberflächenanisotropien irrelevant; sie ergeben Korrekturen zum führenden kritischen Verhalten (Diehl und Eisenriegler, 1982).

2.2 Experimente

Zur Untersuchung der Abweichung der Temperaturabhängigkeit des Oberflächen-Ordnungsparameters von derjenigen des Volumens wurden Experimente mit ganz verschiedenen Techniken durchgeführt. Die meisten dieser Messungen zeigen qualitativ ein geändertes kritisches Verhalten an der Oberfläche. Diejenigen Experimente, die darüber hinaus einen Vergleich mit der Theorie erlauben werden im Folgenden kurz dargestellt. Diese Untersuchungen wurden jeweils an ferromagnetischen Phasenübergängen vorgenommen.

(1) SPLEED (Streuung spinpolarisierter niederenergetischer Elektronen) :

Die Streuintensität polarisierter Elektronenstrahlen bei der Streuung an der Oberfläche eines Ferromagneten hängt davon ab, ob der Elektronenspin parallel ($I_{\uparrow\uparrow}$) oder antiparallel ($I_{\uparrow\downarrow}$) zur Magnetisierung gerichtet ist. Die Streuasymmetrie

$$A_{\text{ex}} = \frac{I_{\uparrow\uparrow} - I_{\uparrow\downarrow}}{I_{\uparrow\uparrow} + I_{\uparrow\downarrow}}$$

ist daher ein Maß für die Oberflächenmagnetisierung m_1 . Die Messung der Temperaturabhängigkeit von m_1 ist möglich, wenn A_{ex} linear von der Magnetisierung abhängt. Diese Bedingung ist im Rahmen der dynamischen LEED-Theorie erfüllt, wenn (Feder 1981)

- (i) die Eindringtiefe viel kleiner als die Korrelationslänge ist und

(ii) die Magnetisierung klein ist, so daß eine Entwicklung nach Potenzen von m_1 möglich wird.

Beide Bedingungen sind in der Nähe von T_C^b für den "gewöhnlichen" Übergang erfüllt.

Die ersten Messungen an Ni-Oberflächen ergaben im Temperaturbereich $0.2 \leq t \leq 0.5$ einen Wert von $\beta_1 = 1$ (Celotta et al. 1979), in Übereinstimmung mit MF-Theorie für den "gewöhnlichen" Übergang". Neuere Experimente (Alvarado et al. 1982) liefern im "kritischen" Temperaturbereich $0.008 \leq t \leq 0.1$ den Wert $\beta_1 = 0.825 + 0.025 - 0.040$, der mit den theoretischen Vorhersagen hervorragend übereinstimmt (siehe Tabelle 2.1).

(2) ECS (Electron Capture Spectroscopy, (Rau 1982)) :

Von streifend an der obersten Atomlage reflektierten schnellen Deuteronen (D^+) werden Elektronen aus der Oberfläche eingefangen, ohne daß die Deuteronen dabei in den Festkörper eindringen. Beim Einelektroneneinfang wird ein Teil der Spinpolarisation der eingefangenen Elektronen durch Hyperfeinwechselwirkung auf den Kernspin übertragen und führt zu einer Kernspinpolarisation. Diese wird mittels Kernreaktionen nachgewiesen. Dabei ist die Elektronenspinpolarisation (ESP) $P(T,H)$ ein Maß für die Oberflächenmagnetisierung m_1 . Voraussetzung für die Übertragung der ESP auf die Kernspinpolarisation ist der adiabatische Übergang der Deuteronen von einem hohen Magnetfeld an der Probe zu einem schwachen Führungsfeld danach. Bei magnetischen Phasenübergängen ist man daher ge-

zwungen, aus den gemessenen Daten auf die Eigenschaften der Probe bei verschwindendem Feld zu extrapolieren.

Wenn man annimmt, daß zwischen $P(T,H)$ und m_1 ein linearer Zusammenhang besteht, dann sollte $P(T,H)$ im kritischen Bereich Skalenverhalten zeigen :

$$|P(T,H)| \cdot |\dot{t}|^{-\beta_1} = g^\pm(H|\dot{t}|^{-\Delta})$$

wobei für β_1 und $\Delta=\beta_1\delta_1$ die Exponenten für ordinary-, special- oder surface-Übergang einzusetzen sind ($\dot{t}$ bezeichnet hier die reduzierte Temperatur für den jeweiligen Übergang). Dabei muß die Skalenfunktion $g^\pm$ das asymptotische Verhalten

$$g^\pm(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} x^{1/\delta_1}$$

besitzen.

Die Ergebnisse der Messungen an polykristallinen Gd-Oberflächen (Rau und Eichner 1981, Eichner 1984) sind mit der Interpretation verträglich, daß es sich bei Gd um den "speziellen" Übergang handelt. Dies ist nur möglich, wenn die Oberflächenkopplungen stark anisotrop und gegenüber den Volumenkopplungen um einen bestimmten Wert erhöht sind (Gd ist im Volumen ein nahezu ideal isotroper Heisenberg-Ferromagnet). Wegen des starken Magnetfeldes kann aus dieser Messung allerdings nur der Schluß gezogen werden, daß $|c-c_{sp}| < H^{\phi_s/\Delta}$ (und nicht

etwa $c=c_{sp}$), d.h. c liegt so nahe bei c_{sp} , daß beim hier verwendeten Feld der Crossover zum "gewöhnlichen" kritischen Verhalten oder zum Oberflächenübergang nicht erreicht werden kann.

Nachfolgende SPLEED-Messungen an einer Gd-Einkristall-Oberfläche zeigen einen reinen Oberflächenübergang, dessen kritische Temperatur T_C^s gegenüber der kritischen Temperatur T_C^b des Volumens deutlich (ca. 10%) erhöht ist (Weller et al. 1985). Außerdem weisen Untersuchungen mittels spin-aufgelöster Photoemissions-Spektroskopie an derselben Probe darauf hin, daß die Magnetisierung in der ersten und in der zweiten Schicht einander entgegen gerichtet sind. Die Interpretation der SPLEED-Ergebnisse ist in diesem Fall wesentlich schwieriger, da möglicherweise Effekte der dynamischen Steutheorie mitberücksichtigt werden müssen (Kirschner 1984).

Tabelle 2.1: Zahlenwerte einiger kritischer Exponenten in $d = 3$.

(a) ϵ -Entwicklung (b) Monte Carlo
(c) Reihenentwicklung (d) $1/n$ -Entwicklung
(e) Experiment

Exponent	n			Referenz
ν	1	0.6305 $\pm$ 0.0025	(a)	Le Guillou und Zinn-Justin (1985)
	3	0.710 $\pm$ 0.007	(a)	
η	1	0.037 $\pm$ 0.003	(a)	
	3	0.040 $\pm$ 0.003	(a)	
β_1^{ord}	1	0.77 $\pm$ 0.02	(c)	Ohno et al. (1984)
	1	0.78 $\pm$ 0.02	(b)	Binder und Landau (1984)
	1	0.80 $\pm$ 0.02	(a)	Diehl und Dietrich (1981a)
	3	0.83 $\pm$ 0.02	(a)	
	3	0.825 $\pm$ 0.04	(e)	Alvarado et al. (1982)
β_1^{sp}	1	0.175 $\pm$ 0.025	(b)	Binder und Landau (1984)
	1	0.235 $\pm$ 0.025	(a)	Diehl und Dietrich (1983)
ϕ_s	1	0.56 $\pm$ 0.04	(b)	Binder und Landau (1984)
	1	0.68	(a)	Diehl und Dietrich (1981b)
γ_1^{ord}	1	0.78 $\pm$ 0.02	(c)	Whittington et al. (1979)
	1	0.80 $\pm$ 0.02	(c)	Ohno et al. (1984)
	1	0.775 $\pm$ 0.01	(a)	Diehl und Dietrich (1981a)
	3	0.94 $\pm$ 0.04	(c)	Ohno et al. (1984)
	3	0.90 $\pm$ 0.03	(a)	Diehl und Dietrich (1981a)
	3	0.69	(d)	Ohno und Okabe (1983a,b)

3. Der Streuquerschnitt für die kritische Röntgenstreuung unter Totalreflexion[†]

Man hat für die kritische Oberflächenstreuung die Auswahl zwischen Röntgen- und Neutronenstreuung. Die Röntgenstreuung hat den Vorteil, daß mit den modernen Synchrotrons eine sehr lichtstarke Quelle zur Verfügung steht. Allerdings können mit Röntgenstreuung keine magnetischen Phasenübergänge untersucht werden. Auch die Untersuchung der kritischen Dynamik an Oberflächen bleibt der Neutronenstreuung vorbehalten. Für die Herleitung des Wirkungsquerschnitts bei Neutronenstreuung unter Totalreflexion wird auf die Arbeit von Dietrich und Wagner (1985) verwiesen.

Der Ausgangspunkt für die Berechnung der Streuung elektromagnetischer Wellen der Frequenz ω in Festkörpern sind die Maxwell-Gleichungen. Der Zusammenhang zwischen den optischen Eigenschaften eines nicht magnetischen Materials und der lokalen Elektronendichte $\rho(\underline{R})$ wird im Laue-Modell durch die skalare Dielektrizitätskonstante

$$\epsilon(\underline{R}) = 1 - \frac{4\pi}{K^2} r_e \rho(\underline{R}) \quad (3.1)$$

hergestellt, wobei $r_e = \frac{e^2}{mc^2}$ der klassische Elektronenradius und $K=\omega/c$ ist. Die Streuung wird dann durch die Gleichung

[†] Eine andere Herleitung des Streuquerschnitts ist bei Dietrich und Wagner (1984) zu finden.

$$\nabla \times \nabla \times \underline{E}(\underline{R}) - K^2 \epsilon(\underline{R}) \underline{E}(\underline{R}) = 0 \quad (3.2)$$

für das elektrische Feld $\underline{E}(\underline{R}) \cdot \exp(-i\omega t)$ beschrieben.

Die Berechnung des Streuquerschnitts erfolgt in zwei Stufen. Dabei wird ausgenützt, daß die auftretenden Längenskalen deutlich voneinander getrennt sind.

Zum einen ist der Durchmesser der Probe wesentlich kleiner als der Abstand zwischen Probe und Detektor, wir benötigen also nur das asymptotische Verhalten des Strahlungsfeldes. Dieses Fernfeld kann auf bequeme und einfache Weise mit Hilfe der Kirchhoff'schen Integralformel (siehe z.B. Jackson, 1962) berechnet werden, die es gestattet, das elektromagnetische Feld an jedem Punkt in einem Volumen V durch die Felder am Rand von V auszudrücken (siehe Fig. 3.1). Dies liefert unmittelbar den gewünschten Ausdruck für das gestreute Feld $\underline{E}_s$ am Ort $\underline{R}$ des Detektors (Jackson, 1962):

$$\underline{E}_s(\underline{R}) = -i \frac{e^{iKR}}{R} \underline{K}_f \times \int_{S_1} d^2r' e^{-i\underline{k}_f \underline{r}'} \left[\underline{n} \times \underline{E}_s - \frac{1}{K} \underline{K}_f \times (\underline{n} \times \underline{B}_s) \right] \quad (3.3)$$

mit $\underline{K}_f = \underline{R} \cdot K/R$ und $iK \underline{B}_s = \nabla \times \underline{E}_s$. Das Integral in (3.3) erstreckt sich über die Oberfläche S_1 der Probe (siehe Fig. 3.1); $\underline{n}$ bezeichnet den (ins Probeninnere gerichteten) Normalenvektor von S_1 , $\underline{k}_f$ die Projektion von $\underline{K}_f$ auf die Oberfläche. Hierbei wird zunächst angenommen, daß es sich um die Streuung an einem Festkörper mit einer ebenen Oberfläche (bei $z=0$) handelt. Die Streu-

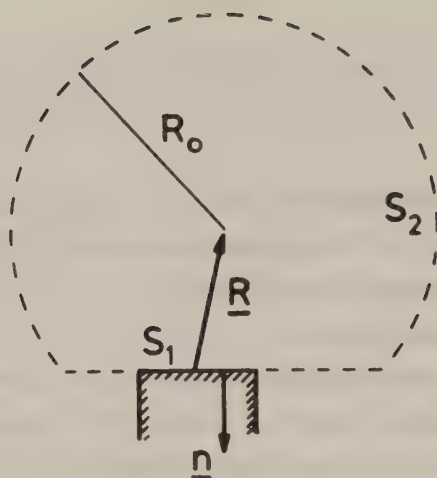


Fig. 3.1: Integrationsgebiete der Kirchhoff'schen Integralformel.

Der Beitrag des Teils S_2 des Randes von V verschwindet für $R_0 \rightarrow \infty$.

welle ist eine auslaufende Kugelwelle, deren Amplitude von den Einzelheiten des Streuvorgangs in der Probe bestimmt wird.

Andererseits sind die Abmessungen der Probe wesentlich größer als die Wellenlänge der einfallenden Strahlung. Für die Berechnung von $\underline{E}_s$ (und $\underline{B}_s$) an der Oberfläche kann daher wieder zu einer halb-unendlich Geometrie übergegangen werden, d.h. Effekte der endlichen Probengröße können hierfür vernachlässigt werden.

Die geringe Wechselwirkung zwischen der einfallenden Strahlung und dem zu untersuchenden Festkörper erlaubt es normalerweise, die Streuung von Röntgenstrahlen in erster Born'scher Näherung zu berechnen. Die Totalreflexion an einer ebenen Grenzfläche ist aber ein Effekt der Vielfachstreuung und muß daher exakt berücksichtigt

werden. Die Variation der Dielektrizitätskonstanten im Festkörper aufgrund der Gitterperiodizität und der Fluktuationen des Ordnungsparameters kann dann wieder in Born'scher Näherung behandelt werden. Diese Methode ist unter dem Namen "Distorted Wave Born Approximation" (DWBA) bekannt. Zu diesem Zweck wird die Dielektrizitätskonstante in zwei Anteile zerlegt,

$$\epsilon(\underline{R}) = \bar{\epsilon}(\underline{z}) + \tilde{\epsilon}(\underline{R}) \quad (3.4)$$

mit

$$\bar{\epsilon}(\underline{z}) = \theta_H(-\underline{z}) + n^2 \theta_H(\underline{z}) \quad ; \quad (3.5)$$

hier bezeichnet n den Brechungsindex eines homogenen Mediums

$$n^2 = 1 - \frac{4\pi}{K^2} r_e \bar{\rho} \quad (3.6)$$

mit der gemittelten Elektronendichte $\bar{\rho}$, und $\theta_H(\underline{z})$ die Heaviside-Funktion. Mit dieser Aufteilung von $\epsilon(\underline{R})$ lautet Gl.(3.2)

$$\mathcal{D}_{\underline{R}} \underline{E} \equiv \nabla \times \nabla \times \underline{E} - K^2 \bar{\epsilon} \underline{E} = K^2 \tilde{\epsilon} \underline{E} \quad (3.7)$$

Mit Hilfe der Tensor-Greensfunktion $G_{\alpha\beta}(\underline{R}, \underline{R}')$ des homogenen Mediums mit Grenzfläche, die durch

$$\mathcal{D}_{\underline{R}}^{\alpha\beta} G_{\beta\gamma}(\underline{R}, \underline{R}') = 4\pi \delta_{\alpha\gamma} \delta(\underline{R} - \underline{R}') \quad (3.8)$$

definiert wird, kann Gl.(3.7) auch als Integralgleichung ge-

schrieben werden :

$$\underline{E}(\underline{R}) = \underline{\bar{E}}(\underline{R}) + \frac{K^2}{4\pi} \int \underline{G}(\underline{R}, \underline{R}') \tilde{\epsilon}(\underline{R}') \underline{E}(\underline{R}') d\underline{R}' \quad (3.9)$$

wobei $\underline{\bar{E}}(\underline{R})$ die Lösung von (3.2) mit der gemittelten Dielektrizitätskonstanten $\bar{\epsilon}$ anstelle von $\epsilon(\underline{R})$ ist. Gl.(3.9) kann iterativ gelöst werden. Man erhält die modifizierte erste Born'sche Näherung, wenn die Iteration nach dem ersten Schritt abgebrochen wird, d.h. wenn $\underline{E}(\underline{R}')$ im Integral durch $\underline{\bar{E}}(\underline{R}')$ ersetzt wird.

Es bleibt übrig $\underline{\bar{E}}(\underline{R})$ und $G_{\alpha\beta}(\underline{R}, \underline{R}')$ zu berechnen. Die Reflexion und Beugung einer (in positiver z-Richtung) einfallenden ebenen Welle $\underline{E}_i = \underline{e} E \exp(i\underline{K}_i \underline{R})$ mit dem Wellenvektor $\underline{K}_i = (\underline{k}_i, k_{z,i})$ und Polarisierung $\underline{e}$ an der ebenen Grenzfläche eines homogenen Mediums ist allgemein bekannt (siehe Fig. 3.2):

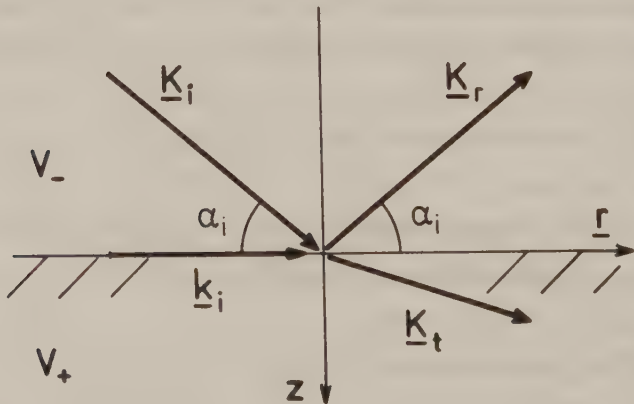


Fig. 3.2: Einfallsebene

$$\underline{\underline{E}}(\underline{R}) = \underline{Y}(k_i, z) \cdot \underline{e} \cdot E e^{ik_i \underline{r}} ; \quad (3.10)$$

die Funktion $\underline{Y}$ hat die Form

$$\underline{Y}(p, z) = (\underline{L} e^{ik_L z} + \underline{R} e^{-ik_L z}) \theta_H(-z) + \underline{T} e^{ik_L z} \theta_H(z) , \quad (3.11)$$

$$\text{mit } k_L = \sqrt{K^2 - p^2} \quad \text{und} \quad k_L' = \sqrt{n^2 K^2 - p^2} .$$

Speziell für $p=k_i$ ist k_L' die z-Komponente des Wellenvektors des transmittierten Strahls:

$$k_{L,i}' = K(n^2 - \cos^2 \alpha_i)^{1/2} \quad (3.12)$$

Die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten $\underline{R}$ und $\underline{T}$ sind durch die Fresnel'schen Formeln gegeben (siehe Anhang). Wird der Winkel α_i kleiner als der Winkel der Totalreflexion α_c — definiert durch $\cos(\alpha_c) = n$ — dann ist in (3.12) die Wurzel mit positivem Imaginärteil zu verwenden.

Die einfachste Methode, die Tensor-Greensfunktion zu erhalten, ist es, die Lösung zu erraten und danach zu zeigen, daß man die richtige Antwort gefunden hat. Dabei kann man sich an der Form der Greensfunktion für die Streuung skalarer Wellen orientieren (Ignatovich, 1975). Das Ergebnis lautet

$$\begin{aligned} \underline{\underline{G}}(\underline{R}, \underline{R}') = & \int d^2 p \, e^{i p (\underline{r} - \underline{r}')} [\underline{\underline{G}}^>(p, z, z') \cdot \theta_H(z - z') + \\ & + \underline{\underline{G}}^<(p, z, z') \cdot \theta_H(z' - z)] \end{aligned} \quad (3.13)$$

mit

$$G_{\alpha\beta}^>(p, z, z') = - \sum_{i=1}^2 \frac{1}{2ik_L} Y_{\alpha\mu}(p, z) H_{\beta\nu}(p, z') e_{\mu}^{(i)} e_{\nu}^{(i)} \quad (3.14a)$$

$$G_{\alpha\beta}^<(p, z, z') = - \sum_{i=1}^2 \frac{1}{2ik_L} H_{\alpha\mu}(p, z) Y_{\beta\nu}(p, z') e_{\mu}^{(i)} e_{\nu}^{(i)} \quad (3.14b)$$

wobei

$$\underline{H}(p, z) = \underline{1} e^{-ik_L z} \theta_H(-z) + \underline{T}'^{-1} (\underline{1} e^{-ik_L' z} + \underline{R}' e^{ik_L' z}) \theta_H(z) \quad (3.15)$$

$\underline{H} \cdot \underline{e}$ beschreibt die Reflexion und Beugung einer ebenen Welle, die sich in negativer z-Richtung ausbreitet; $\underline{T}'$ und $\underline{R}'$ sind die entsprechenden Transmissions- und Reflexionskoeffizienten (siehe Anhang). Die $\underline{e}^{(i)}$ in (3.14) bezeichnet die beiden orthogonalen Polarisationsvektoren einer ebenen Welle mit Wellenvektor $\underline{Q} = (\underline{p}, \pm k_L)$ für $z \gtrless z'$. Es gilt (siehe z.B. Schiff, 1968)

$$P_{\mu\nu} := \sum_{i=1}^2 e_{\mu}^{(i)} e_{\nu}^{(i)} = \delta_{\mu\nu} - \frac{Q_{\mu} Q_{\nu}}{Q^2} \quad (3.16)$$

Einsetzen der Ergebnisse (3.9), (3.10) und (3.13) in das Kirchhoff'sche Integral (3.3) liefert unmittelbar für das gestreute Feld $\underline{E}_S$ ($= \underline{E} - \underline{\bar{E}}$)

$$\underline{E}_S(\underline{R}) = \frac{1}{4\pi i} \frac{e^{iKR}}{R} \int_{z' > 0} d^3 R' \tilde{\epsilon}(\underline{R}') e^{-ik_f \underline{r}'} \underline{K}_f \times [\underline{K}^2 \underline{n} - \underline{K}_f \times \underline{n} \times \tilde{\underline{Q}}] \times \underline{G}^<(\underline{k}_f, z''=0^-, z') \underline{\bar{E}}(\underline{R}') \quad (3.17)$$

wobei $\tilde{\underline{Q}} = (\underline{k}_f, -id/dz'')$. Einfache Vektor-Algebra ergibt dann schließ-

lich (man beachte, daß $\underline{K}_f = (\underline{k}_f, -k_{\perp f})$)

$$E_{\alpha}^S(\underline{R}) = -r_e \frac{e^{iKR}}{R} e_{\alpha}^{fi} E \int_{z' > 0} \tilde{\rho}(\underline{R}') e^{i(\underline{k} \underline{r}' + \kappa z')} d^3 R'. \quad (3.18)$$

Hier ist $\underline{e}^{fi}$ gegeben durch

$$e_{\alpha}^{fi} = P_{\alpha\beta}^f T_{\beta\gamma}^f T_{\gamma\lambda}^i e_{\lambda} \quad (3.19)$$

mit den Transmissionskoeffizienten $\underline{T}^{i,f} = \underline{T}(\hat{\underline{K}}_{i,f})$, $\underline{P}^f = \underline{P}(\hat{\underline{K}}_f)$ und $\hat{\underline{K}}_{i,f} = \underline{K}_{i,f}/K$. Außerdem ist $\underline{k} = \underline{k}_i - \underline{k}_f$ der parallele Impulsübertrag und

$$\kappa = K[(\sin^2 \alpha_i - \sin^2 \alpha_c)^{1/2} + (\sin^2 \alpha_f - \sin^2 \alpha_c)^{1/2}] \quad (3.20)$$

Aus Gl. (3.18) erhält man durch thermische Mittelung des Poynting-Vektors schließlich den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_e^2 |\underline{e}^{fi}|^2 \Sigma(\underline{\Delta}) \quad (3.21)$$

mit

$$\Sigma(\underline{\Delta}) = \langle |\int e^{i\underline{\Delta} \cdot \underline{R}} \tilde{\rho}(\underline{R}) d^3 R|^2 \rangle \quad (3.22)$$

und $\underline{\Delta} = (\underline{k}, \kappa)$.

Der Ausdruck (3.21), (3.22) für den Wirkungsquerschnitt ist eine Verallgemeinerung der van-Hove Formel für die Volumenstreuung; im

Spezialfall α_i und α_f wesentlich größer als α_c stimmen die beiden Ausdrücke für den Streuquerschnitt überein.

Für Oberflächenuntersuchungen muß α_i oder α_f kleiner als α_c gewählt werden; dann besitzt κ einen positiven Imaginärteil, so daß die Streuung effektiv auf eine Schicht der Dicke $l = (\text{Im } \kappa)^{-1}$ beschränkt ist. Die Eindringtiefe ist dabei typischerweise einige 10 Atomlagen und kann durch Änderung von α_i , α_f variiert werden (sie ist allerdings nach unten beschränkt, vgl. Gl. (3.20)).

Für Oberflächenstreuexperimente mit Röntgenstrahlung zur Untersuchung des kritischen Oberflächenverhaltens sind binäre Legierungen, die einen kontinuierlichen Ordnungs-Unordnungsübergang besitzen, besonders geeignet. Als Materialien kommen die Standard-Systeme für Ordnungs-Unordnungsphänomene CuZn und Fe_3Al in Betracht; Fe_3Al ist dabei wegen des größeren Unterschieds in der Elektronendichte seiner Komponenten für Röntgenstreuexperimente vorzuziehen. Der Wirkungsquerschnitt (3.21), (3.22) kann für ein solches System weiter vereinfacht werden.

Die Elektronendichte hat in einer kristallinen binären Legierung aus A- und B-Atomen die allgemeine Form

$$\rho(\underline{R}) = \sum_n \rho_n(\underline{R} - \underline{R}_n) \quad (3.23)$$

wobei $\{\underline{R}_n\}$ die Gittervektoren eines Bravais-Gitters mit Basis bezeichnet und ρ_n die Elektronendichte in der Einheitszelle bei $\underline{R}_n$. Wenn man berücksichtigt, daß in (3.22) für $k \neq 0$ — im Folgenden wird ausschließlich dieser Fall betrachtet — $\tilde{\rho}(\underline{R}) = \rho(\underline{R}) - \bar{\rho}$ durch

$\rho(\underline{R})$ ersetzt werden kann, dann ergibt sich mit (3.23)

$$\Sigma = \sum_{m,n} \langle F_m F_n^* e^{i(\underline{\Delta} \underline{R}_m - \underline{\Delta}^* \underline{R}_n)} \rangle ; \quad (3.24)$$

die Strukturfaktoren F_n sind hierbei durch

$$F_n = \int \rho_n(\underline{R}) e^{i\underline{\Delta} \underline{R}} d^3 R \quad (3.25)$$

definiert.

Wenn in der ungeordneten Phase nur ein Platz in der Einheitszelle zufällig mit einem A- oder B-Atom besetzt ist, wie im Fall von Fe_3Al und $CuZn$, dann kann F_n in der Form

$$F_n = \bar{F} + \tilde{F} \cdot s_n \quad (3.26)$$

geschrieben werden. Die Variable s_n nimmt die Werte +1 oder -1 an, wenn ein A- oder B-Atom auf dem obengenannten Gitterplatz sitzt.

$\bar{F}$ ist der gemittelte Strukturfaktor in der ungeordneten Phase und $\tilde{F}$ bezeichnet die Differenz der atomaren Formfaktoren von A und B.

Für die kritische Streuung ist nur der Beitrag $\tilde{\Sigma}$ von $\tilde{F} \cdot s_n$ zu Σ von Bedeutung. Der thermische Mittelwert in $\tilde{\Sigma}$ enthält sowohl die Besetzung der Gitterplätze als auch die Gitterfreiheitsgrade (Phononen). Unter der Annahme, daß dieser Mittelwert faktorisiert, ergibt sich dann

$$\tilde{\Sigma} = |\tilde{F}|^2 \sum_{m,n} \langle s_m s_n \rangle \langle e^{i(\underline{\Delta} \underline{R}_m - \underline{\Delta}^* \underline{R}_n)} \rangle \quad (3.27)$$

Es ist zu erwarten, daß diese Näherung für die Oberflächenstreuung gerechtfertigt ist, wenn die Streuexperimente im Volumen keinen Hinweis auf einen Einfluß der Gitterelastizität auf die kritischen Fluktuationen liefern. Der Gitteranteil des Mittelwerts in Gl. (3.27) kann auf die übliche Weise berechnet werden; er führt zu einem Debye-Waller Faktor und zu einem Beitrag, der die thermisch diffuse Streuung (TDS) beschreibt.

Sei nun $\underline{\lambda}$ ein reziproker Gittervektor, der die geordnete Struktur für $T < T_C$ charakterisiert, und der parallel zur Oberfläche liegt (siehe Fig. 3.3). Der lokale Ordnungsparameter ϕ_n wird dann durch

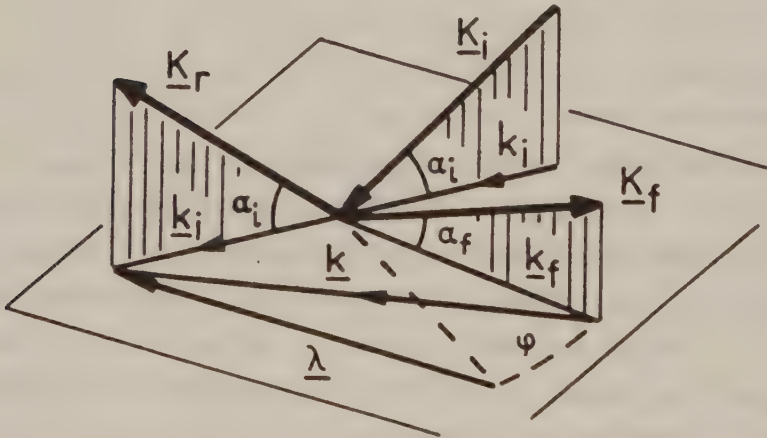


Fig 3.3: Streugeometrie. $\underline{K}_i$, $\underline{K}_r$ und $\underline{K}_f$ sind die Wellenvektoren von einfallender, reflektierter und gestreuter Welle. $|\underline{K}_i| = |\underline{K}_r| = |\underline{K}_f| = K$. Der Vektor $\underline{\lambda}$ charakterisiert die geordnete Struktur der binären Legierung; er liegt in der Oberfläche. $\underline{p} = \underline{k} - \underline{\lambda}$ mit $p \approx K|\varphi|$.

$$s_n = \phi_n \exp(i\lambda \underline{r}_n) + \sigma_n \quad (3.28)$$

definiert. Die Größe σ_n in (3.28) beschreibt die Abweichungen von der Stöchiometrie, die von einem geänderten chemischen Potential μ_s an der Oberfläche verursacht werden; Ursache dafür sind die im allgemeinen im Volumen und an der Oberfläche unterschiedlichen Bindungsenergien von A- und B-Atomen. Glücklicherweise ist das chemische Potential μ_s ein nicht-ordnendes Feld, das für das kritische Verhalten am Ordnungs-Unordnungsübergang irrelevant ist und daher im weiteren vernachlässigt wird.

Die dominante kritische Temperatur- und Winkelabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts in der Nähe der Position eines Überstrukturreflexes lautet damit insgesamt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_e^2 \left| \underline{e}^{fi} \tilde{F} \right|^2 [\bar{S}(p, \kappa) + \hat{S}(p, \kappa)] \quad (3.29)$$

wobei der Debye-Waller Faktor in $\tilde{F}$ absorbiert wurde, und

$$\bar{S}(p, \kappa) = \left| \sum_n \langle \phi_n \rangle e^{i(p \underline{r}_n + \kappa z_n)} \right|^2 \quad (3.30)$$

$$\hat{S}(p, \kappa) = \sum_{m,n} G(\underline{r}_m - \underline{r}_n, z_m, z_n) \cdot e^{ip(\underline{r}_m - \underline{r}_n)} e^{i(\kappa z_m - \kappa^* z_n)} \quad (3.31)$$

mit der Abkürzung $p = \underline{k} - \underline{\lambda}$.

(3.29) bis (3.31) bilden die Grundlage für die Interpretation von Oberflächenstreuexperimenten an binären Legierungen in der Nähe von T_c . Die Intensität der Überstrukturreflexe wird durch den Bei-

trag $\bar{S}$ zum Wirkungsquerschnitt bestimmt; sie liefert Information über das OP-Profil und dessen Temperaturabhängigkeit. Die diffuse Streuintensität ist durch $\tilde{S}$ gegeben; sie spiegelt das Verhalten der oberflächennahen Korrelationen wider.

Da für $\xi \rightarrow \infty$ die Gitterstruktur irrelevant wird, können schließlich in der Nähe des kritischen Punktes die Gittersummen in (3.30) und (3.31) durch Integrale ersetzt werden. Für Materialien mit einer kubischen Einheitszelle (Gitterkonstante a) wie Fe_3Al ergibt dies

$$\bar{S}(\underline{p}, \kappa) = (2\pi)^2 \delta^{(2)}(\underline{p}) \frac{\mathcal{F}}{a^6} \left| \int_0^{\infty} dz e^{i\kappa z} \langle \phi(z) \rangle \right|^2 \quad (3.32)$$

$$\tilde{S}(\underline{p}, \kappa) = \frac{\mathcal{F}}{a^6} \int_0^{\infty} dz e^{i\kappa z} \int_0^{\infty} dz' e^{-i\kappa^* z'} \int d^2r e^{i\underline{p}\underline{r}} G(\underline{r}, z, z') \quad (3.33)$$

Hier bezeichnet $\mathcal{F}$ die Größe der beleuchteten Oberfläche. $\delta^{(2)}(\underline{p})$ ist die zweidim. δ -Funktion.

Bei der Berechnung des gestreuten Feldes (siehe Gl.(3.3)) haben wir uns bisher auf den Fall einer ebenen Oberfläche beschränkt. Nun soll noch kurz diskutiert werden, wie sich die Streuintensität bei einer rauen Oberfläche berechnen läßt[†].

Die Oberflächenrauigkeit wird im Rahmen der DWBA behandelt, wobei wieder die Aufteilung (3.4), (3.5) der Dielektrizitätskonstanten verwendet wird. In dieser Näherung können dann vier

[†] Die Neutronenstreuung an rauen Oberflächen wurde von Steyerl (1972) behandelt.

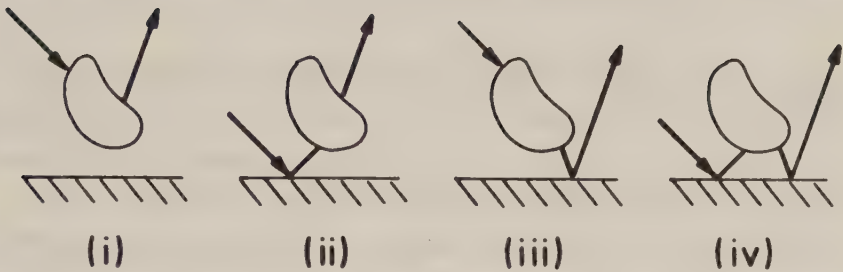


Fig. 3.4: Verschiedene Prozesse der Streuung im Außenraum

verschiedene Beiträge zum gestreuten Feld von der Streuung im "Außenraum" $V_- = \{\underline{R}; z < 0\}$ unterschieden werden, die in Fig. 3.4 schematisch angegeben sind. Für die Fälle (iii) und (iv) (erst Streuung des einfallenden bzw. reflektierten Strahls an den Abweichungen $\hat{\epsilon}$, dann Reflexion der gestreuten Strahlung an der Grenzfläche $z=0$) wird wieder das Kirchhoff'sche Integral (3.3) verwendet; dies führt zu einem ähnlichen Ausdruck wie zuvor in Gl.(3.17): das Integral erstreckt sich jetzt über den Halbraum V_- , und $\underline{G}^<$ ist durch $\underline{G}^>$ zu ersetzen. Dieser Anteil zu $\underline{E}_s$ ergibt nach Einsetzen von $\underline{G}^>$:

$$\underline{E}_s^{(1)}(\underline{R}) = -r_e \frac{e^{iKR}}{R} \int_{z' < 0} d^3R' \hat{\rho}(\underline{R}') e^{-i\vec{k}_f \underline{R}'} e^{-i\vec{k}_{l,f} z'} \underline{p}_{R'}^f \underline{E}(\underline{R}') \quad (3.34)$$

Die beiden anderen Beiträge (direkte Streuung des einfallenden bzw. reflektierten Strahls) werden hingegen direkt in (normaler)

Born'scher Näherung berechnet:

$$\underline{E}_S^{(2)}(\underline{R}) = -r_e \frac{e^{iKR}}{R} \int_{z' < 0} d^3R' \rho(\underline{R}') e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}'} e^{+i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}'} \underline{P}^f \underline{E}(\underline{R}') \quad (3.35)$$

Addition von $\underline{E}_S^{(1)}$ und $\underline{E}_S^{(2)}$ zum Streufeld (3.18) ergibt dann schließlich das gewünschte Ergebnis. Die Streuung von Röntgenstrahlen an einer rauen Oberfläche wird in Kap.6 ausführlicher untersucht.

4. Diffuse Streuung : Korrelationsfunktion für $T \geq T_c$

Ziel dieses Kapitels ist es, aus der Theorie für die kritischen Phänomene in halbbunendlichen Systemen Vorhersagen für die diffuse Streuintensität zu gewinnen.

4.1 Exakte Ergebnisse

4.1.1 Renormierung[†]

Ausgangspunkt für die folgenden Überlegungen ist das Kontinuumsmodell (2.2). Für die Berechnung von Korrelationsfunktionen wird eine Störungsentwicklung nach der Kopplung g verwendet, die sogenannte Feynman-Graphen Entwicklung. Die Diagonalisierung des quadratischen Anteils des Hamilton-Funktional (2.2) liefert den freien Propagator

$$G_0(p, z, z') = \frac{1}{2b} \left[e^{-b|z-z'|} - \frac{c_0-b}{c_0+b} e^{-b(z+z')} \right] \quad (4.1)$$

mit

$$b = \sqrt{p^2 + \tau} \quad , \quad (4.2)$$

[†] Begriffe und Techniken der feldtheoretischen Renormierung werden bei Amit (1984) ausführlich dargestellt und im Folgenden als bekannt vorausgesetzt; eine Beschreibung der feldtheoretischen Renormierung in halbbunendlichen Systemen ist bei Diehl (1985) zu finden.

wobei $G_0(\underline{p}, z, z')$ die Fouriertransformierte von $G_0(\underline{r}, z, z')$ bezüglich der Koordinaten parallel zur Oberfläche bezeichnet (pz-Darstellung).

Die Laplace-Transformation der Korrelationsfunktion $G(\underline{p}, z, z')$ bezüglich der Koordinaten senkrecht zur Oberfläche liefert die diffuse Streuintensität (3.33). Wir werden von nun an bis einschließlich Kap.5 die für die Totalreflexion "angepaßte" Variable $\bar{\kappa} = -i\kappa$ mit $\text{Re}(\bar{\kappa}) > 0$ anstelle von κ verwenden. Um die Notation möglichst einfach zu halten wird der Querstrich im Folgenden wieder weggelassen:

$$G(\underline{p}, \kappa, \kappa^*) = \int_0^\infty dz e^{-\kappa z} \int_0^\infty dz' e^{-\kappa^* z'} G(\underline{p}, z, z') \quad (4.3)$$

Für den freien Propagator ergibt sich

$$\begin{aligned} G_0(\underline{p}, \kappa, \kappa^*) &= \int_0^\infty dz e^{-\kappa z} G_0(\underline{p}, z, z') \\ &= \frac{1}{\kappa^2 - b^2} (e^{-b z'} - e^{-\kappa z'}) + \frac{1}{(\kappa + b)(c_0 + b)} e^{-b z'} \end{aligned} \quad (4.4)$$

und

$$G_0(\underline{p}, \kappa, \kappa^*) = \frac{1}{|\kappa + b|^2} \left(\frac{1}{2\text{Re}\kappa} + \frac{1}{c_0 + b} \right). \quad (4.5)$$

Bei der Berechnung von Feynman-Diagrammen treten UV-Singularitäten auf. Die Renormierung gibt an, wie diese Singularitäten behandelt werden müssen :

- (i) Die Feynman-Diagramme erhalten erst dann eine sinnvolle Bedeutung, wenn ein Regularisierungsschema angegeben wird. Physikalisch gesehen ist ein Impuls-Cutoff Λ vorhanden, der beim

Übergang vom Gitter zum Kontinuum eingeführt werden muß. In dieser Arbeit wird durchgehend Dimensionsregularisierung verwendet, da diese technisch einfacher ist. Die UV-Singularitäten zeigen sich dann in Form von Poltermen in $\epsilon=4-d$.

- (ii) Die Divergenzen können in neuen Parametern u, t, ϕ_R und c absorbiert werden, die auf folgende Weise definiert sind :

$$\begin{aligned}\phi &= Z_\phi^{1/2} \phi_R \\ \tau &= \mu^2 Z_t t + \tau_b \\ g &= \mu^\epsilon Z_g^{d/2} g \\ c_0 &= \mu Z_c c + c_{sp}\end{aligned}\tag{4.6}$$

mit einer willkürlichen Impulsskala μ .

τ_b und c_{sp} sind die Werte für τ und c_0 , die dem speziellen Übergang entsprechen; sie verschwinden in Dimensionsregularisierung. Die Z -Faktoren, die man bei minimaler Subtraktion der Polterme erhält, sind bis einschließlich $O(u^2)$ bei Diehl und Dietrich (1981a,b) angegeben.

Die renormierte Korrelationsfunktion

$$G_R(p, \kappa, \kappa^* | u, t, c, \mu) = Z_\phi^{-1} G(p, \kappa, \kappa^* | g, \tau, c_0)\tag{4.7}$$

erfüllt die Renormierungsgruppen (RG)-Gleichung

$$[\mu \partial_\mu + \beta_u \partial_u - (2 + \eta_t) t \partial_t - (1 + \eta_c) c \partial_c + \eta_\phi] G_R = 0\tag{4.8}$$

mit $\beta_u := \mu \partial_\mu|_0 u$ und $\eta_w := \mu \partial_\mu|_0 \ln Z_w$, $w = \phi, t, c$, wobei $\partial_\mu|_0$ die Ableitung bei festgehaltenen "nackten" Parametern τ, g, c_0 bezeichnet.

Die Exponenten η, ν und ϕ_s ergeben sich aus den Zahlenwerten

$\eta_w^* = \eta_w(u^*)$ am infrarot-stabilen Fixpunkt $\beta_u(u^*) = 0$:

$$\begin{aligned} \nu &= (2 + \eta_t^*)^{-1} \\ \eta &= \eta_\phi^* \\ \phi_s &= \nu(1 + \eta_c^*) \end{aligned} \quad (4.9)$$

Die Lösung der RG-Gleichung (4.8) lautet am Fixpunkt

$$G_R(p, \kappa, \kappa^*) = D_0 |\kappa|^{-3+\eta} \Psi(p\xi, |\kappa|\xi, \zeta, \frac{c}{c_0^+ t \phi_s}) \quad (4.10)$$

mit $\zeta = \text{Re}(\kappa)/|\kappa|$. In (4.10) sind die Amplituden D_0 , c_0^+ und die Amplitude der Korrelationslänge nicht universelle Parameter; bei geeigneter Normierung ist jedoch die Skalenfunktion Ψ selbst universell. Da die Bulk-Korrelationsfunktion $G_b(p; t)$ als Spezialfall in (4.10) enthalten ist,

$$\lim_{\text{Re} \kappa \rightarrow 0} \lim_{\text{Im} \kappa \rightarrow 0} (\kappa + \kappa^*) G_R(p, \kappa, \kappa^*) = G_b(p; t) \quad , \quad (4.11)$$

kann ξ in (4.10) mit der Bulk-Korrelationslänge (zweites Moment der Korrelationsfunktion G_b) und D_0 mit der Amplitude von G_b für $T=T_c$ identifiziert werden:

$$\xi^2 = \frac{\int dR R^2 G_b(R)}{\int dR G_b(R)} \quad (4.12)$$

$$G_D(p; t=0) = D_0 p^{-2+\eta} \quad (4.13)$$

Für die Amplitude c_0^+ muß eine neue Normierungsbedingung definiert werden. Dazu betrachten wir das Verhalten von G_R für $p=0$, $\text{Im}(\kappa)=0$ und $\kappa \rightarrow \infty$:

$$G_R(p=0, \kappa, \kappa) = |\kappa|^{-3+\eta+\gamma_{11}^{sp}/\nu} \chi_{11}(t, c) \quad (4.14)$$

χ_{11} ist hier die in (2.5) definierte Oberflächen-Suszeptibilität:

$$\chi_{11} = t^{-\gamma_{11}^{sp}} \psi_{11}(\hat{c}) \quad (4.15)$$

mit $\hat{c} = c/(c_0^+ t^{\phi_s})$. Da χ_{11} für $t \rightarrow 0$ bei festem $c > 0$ das für den "gewöhnlichen" Übergang charakteristische Verhalten zeigen muß, kann ψ_{11} für $\hat{c} \rightarrow \infty$ nur die folgende Form besitzen (Goldschmidt, 1983):

$$\psi_{11}(\hat{c}) = A_{\infty}^{(0)} \hat{c}^{-\gamma_{11}^{sp}/\phi_s} + A_{\infty}^{(1)} \hat{c}^{-(\gamma_{11}^{ord} - \gamma_{11}^{sp})/\phi_s} + \dots \quad (4.16)$$

Wir wählen nun die Amplitude c_0^+ so, daß

$$A_{\infty}^{(0)} \equiv -A_{\infty}^{(1)} \quad (4.17)$$

Die Skalenform (4.10) liefert einen allgemeinen Rahmen für die Korrelationsfunktion; für die Untersuchung der Oberflächeneigenschaften reicht die Skalenform allein jedoch nicht aus, die Skalenfunktion selbst wird dazu benötigt.

In der Temperatur- und Winkelabhängigkeit der Streuintensität dominiert das kritische Oberflächenverhalten, wenn die Eindringtiefe ℓ sehr viel kleiner ist als die Korrelationslänge ξ . Dieser Fall wird im nächsten Kapitel ausführlich diskutiert. Ist umgekehrt ℓ deutlich größer als ξ , so dominiert das Volumenverhalten. Dennoch kann man auch in diesem Fall Information über die Oberflächen erhalten; für $\kappa \in \mathbb{R}$, $p=0$ und $\kappa \rightarrow 0$ läßt sich leicht zeigen, daß

$$G_R(p=0, \kappa, \kappa) = \frac{1}{2 \cdot \kappa} \chi_b + \chi_s + O(\kappa) . \quad (4.18)$$

Diese Beziehung ist auch für $T < T_c$ gültig. Man hat damit die Möglichkeit, den Exponenten γ_s der Überschuß-Suszeptibilität χ_s sowie die universellen Amplitudenverhältnisse

$[\chi_s^{(\pm)} / (\chi_b^{(\pm)} \xi_o^{(\pm)})]_{sp, ord}$ und $[\chi_s^{(+)} / \chi_s^{(-)}]_{sp, ord}$ experimentell zu bestimmen (vergl (2.21), (2.22)). Ein ähnliches Verfahren wurde bei Monte-Carlo Simulationen verwendet, um χ_s zu ermitteln (Landau 1976a,b).

4.1.2 Short-Distance-Entwicklung

Für $t=0$, $p/|\kappa| \rightarrow 0$ und für $p=0$, $|\kappa| \xi \rightarrow \infty$ besitzt die Skalenfunktion Ψ in (4.10) Singularitäten, die das kritische Oberflächenverhalten widerspiegeln. Einen systematischen Zugang zur Berechnung der zugehörigen Exponenten liefert die sogenannte "Short-Distance"-Entwicklung (SDE) (Brezin et al., 1976; Amit, 1984), die von Diehl

und Dietrich (1981a,1983) auf das Oberflächenverhalten übertragen wurde. Das Ordnungsparameterfeld $\phi(\underline{r},z)$ kann für kleine z entwickelt werden:

$$\phi(\underline{r},z) = \sum_i C_i(z) A_i(\underline{r},0^+) ; \quad (4.19)$$

hierbei sind die A_i 's Oberflächen-Operatoren, die dieselbe interne Symmetrie besitzen wie $\phi(\underline{r},z)$. Dies bedeutet, daß die A_i 's ungerade Potenzen von ϕ und den Ableitungen von ϕ bezüglich z und den Parallelkoordinaten sind. Die führenden Beiträge für $z \rightarrow 0$ kommen von den Koeffizienten der Operatoren, die die niedrigste Dimension besitzen.

Die folgenden Betrachtungen werden für den Fixpunkt $c_0 = \infty$ des "gewöhnlichen" Übergangs durchgeführt. Das kritische Verhalten am "speziellen" Übergang $c=0$ wird dann in Kap.4.1.4 kurz diskutiert.

Infolge der Dirichlet-Randbedingung für $c_0 = \infty$ verschwinden viele der oben erwähnten Oberflächen-Operatoren. Der Operator mit der niedrigsten Dimension ist dann $\partial_z \phi(\underline{r},0) =: \phi^1(\underline{r},0)$; die Operatoren der nächsthöheren Ordnung sind $\partial_z^2 \phi^1(\underline{r},0)$, $\partial_{\parallel}^2 \phi^1(\underline{r},0)$ und $\tau \phi^1(\underline{r},0)$. Nicht alle diese Operatoren sind linear unabhängig. Die klassische Bewegungsgleichung für das Funktional (2.2) liefert nämlich eine Relation zwischen den folgenden Korrelationsfunktionen für $z > 0$:

$$\begin{aligned} & \langle (-\partial_z^2 + p^2 + \tau) \phi^1(\underline{p},z) \phi_1 \dots \phi_N \rangle + \\ & + \frac{g}{6} \langle \partial_z \phi^3(\underline{p},z) \phi_1 \dots \phi_N \rangle = \delta_{N,1} \delta'(z-z_1) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Die Durchsicht der Graphen niedriger Ordnung zeigt, daß der Term mit dem ϕ^3 -Einschub im Limes $z \rightarrow 0$ verschwindet. Man hat daher nur die folgenden Oberflächen-Operatoren in dieser Ordnung zu berücksichtigen:

$$\phi(p, z) = C(z) \phi^1(p, 0) + D_1(z) \tau \phi^1(p, 0) + D_2(z) p^2 \phi^1(p, 0) + \dots \quad (4.21)$$

Die Renormierung der Operatoren in (4.21) als Einschübe in Korrelationsfunktionen ist bekannt. Es wird daher kein Exponent auftreten, der nicht durch die üblichen Volumen- und Oberflächenexponenten ausgedrückt werden kann.

Als erstes soll untersucht werden, wie sich die Korrelationsfunktion für $p=0$, $t \rightarrow 0$ verhält. Dazu wird zunächst die allgemeine Korrelationsfunktion $G_{\text{ord}}^{(N, M, L, K)}$ definiert:

$$G_{\text{ord}}^{(N, M, L, K)} = \left\langle \prod_{i=1}^N \phi(\underline{r}_i, z_i) \prod_{j=1}^M \int d\underline{R}_j \phi^2(\underline{R}_j) \prod_{l=1}^L \phi^1(\underline{r}_l, z=0) \prod_{k=1}^K \phi^1(\underline{r}_k, z=0) \right\rangle \quad (4.22)$$

(der Index "ord" wird im Folgenden weggelassen, wenn er sich aus dem Kontext ergibt). Diese Korrelationsfunktionen sind mit Hilfe der Z-Faktoren (4.6) nicht renormierbar, wenn sie ein oder mehrere Oberflächenfelder $\phi^1(\underline{r}, z=0)$ enthalten, dazu wird ein neuer Z-Faktor z_1^1 benötigt (Diehl und Dietrich, 1980, 1981a). Die renormierten Korrelationsfunktionen

$$G_R^{(N, M, L, K)} = z_\phi^{-\frac{N+L}{2}} z_\tau^{-M} (z_1^1)^{-\frac{L}{2}} G^{(N, M, L, K)} \quad (4.23)$$

erfüllen die RG-Gleichung

$$[\mu \partial_\mu + \beta_u \partial_u - (2+\eta_t) t \partial_t + \frac{N+L}{2} \eta_\phi + M \eta_t + \frac{L}{2} \eta_1] G_R^{(N,M,L,K)} = 0 \quad (4.24)$$

für $N+L>0$, mit $\eta_1 = \mu \partial_\mu \ln Z_1^{-1}$. Man beachte, daß die Einschübe von ϕ^2 nicht renormiert werden müssen; es kann gezeigt werden, daß der entsprechende Z-Faktor $Z \equiv 1$ ist (Diehl et al., 1983). Einsetzen der Entwicklung (4.21) in die Korrelationsfunktion $G^{(N,M,L,0)}$ ergibt dann

$$G^{(N+1,M,L,0)}(\underline{x}, z, \underline{x}_1, z_1, \dots, \underline{x}_N, z_N; \underline{x}_1', \dots, \underline{x}_L') \\ = [C(z) + D_1(z) \tau] G^{(N,M,L+1,0)}(\underline{x}_1, z_1, \dots, \underline{x}_N, z_N; \underline{x}, \underline{x}_1', \dots, \underline{x}_L') \quad (4.25)$$

für $(N,M,L) \neq (0,0,1)$. Aus den homogenen RG-Gleichungen (4.24) für $G_R^{(N+1,M,L,0)}$, $G_R^{(N,M,L+1,0)}$ und $(\tau G^{(N,M,L+1,0)})_R$ erhält man RG-Gleichungen für $C(z)$ und $D_1(z)$

$$[\mu \partial_\mu + \beta_u \partial_u - \frac{\eta_1}{2}] C(z) = 0 \quad (4.26)$$

$$[\mu \partial_\mu + \beta_u \partial_u - \frac{\eta_1}{2} - \eta_t] D_1(z) = 0 \quad (4.27)$$

deren Lösung am Fixpunkt $u=u^*$ lautet

$$C(z) = \mu^{-1} (\mu z)^{1+\eta_1^*/2} \quad (4.28)$$

$$D_1(z) = \mu^{-3} (\mu z)^{1+\eta_1^*/2+1/\nu} \quad (4.29)$$

Eine Ausnahme bildet $G_{\text{ord},R}^{(1,0,1,0)}$; während alle anderen Korrelationsfunktionen in der Störungstheorie für $z \rightarrow 0$ die Form $z \cdot$ (Potenzen von $\ln z$) besitzen, findet man für $G_{\text{ord},R}^{(1,0,1,0)}$ eine logarithmische Divergenz. Dies führt zu einer Modifikation von (4.25) für $(N,M,L) = (0,0,1)$ (Diehl, 1985):

$$G_{\text{ord},R}^{(1,0,1,0)}(\underline{x}, z; \underline{x}_1) = \delta(\underline{x} - \underline{x}_1) G_{\text{ord},R}^{(1,0,1,0)}(p=0; z; t=0) + C(z) G_{\text{ord},R}^{(0,0,2,0)}(\underline{x}, \underline{x}_1) + O(z^2) \pmod{\ln z} \quad (4.30)$$

wobei

$$G_{\text{ord},R}^{(1,0,1,0)}(p=0; z; t=0) = (\mu z)^{1-\eta_1} . \quad (4.31)$$

Für das Verhalten von $G^{(2,0,0,0)} \cong G$ für $z \rightarrow 0$ und $z' \rightarrow 0$ muß in der SDE das spezielle Verhalten von $G^{(1,0,1,0)}$ berücksichtigt werden. Eine andere Möglichkeit ist es, die Entwicklung (4.21) in die dritte Ableitung der Zweipunkt-Korrelationsfunktion bezüglich t einzusetzen:

$$G_R^{(2,3,0,0)}(p=0, z, z'; t) = [C(z) + t D_1(z)] [C(z') + t D_1(z')] \quad (4.32)$$

$$G_R^{(0,3,2,0)}(p=0; t)$$

$G_R^{(0,3,2,0)}$ kann wieder mit Hilfe der RG-Gleichung berechnet werden:

$$G_R^{(0,3,2,0)}(p=0, t) = \mu^{-5} t^{\nu(\eta_\phi^* + \eta_1^* - 3\eta_t^* - 5)} \quad (4.33)$$

Durch Integration von (4.32) bezüglich t und nachfolgender Laplace-Transformation bezüglich z und z' erhält man dann schließlich unter Verwendung der Skalenrelationen (2.16), (4.9) und

$$\eta_{||} = 2 + \eta + \eta_1^* \quad (4.34)$$

das Ergebnis ($\mu=1$ gesetzt):

$$G_R(p=0, \kappa, \kappa^*; t) = |\kappa|^{-3+\eta} A_0(\zeta)$$

$$[1 + A_1(\zeta) (t|\kappa\xi_0^+|^{-1/\nu})^{-\gamma_{11}} + \quad (4.35)$$

$$+ A_2(\zeta) (t|\kappa\xi_0^+|^{-1/\nu}) + A_3(\zeta) (t|\kappa\xi_0^+|^{-1/\nu})^{-\gamma_{11}+1}$$

$$+ A_4(\zeta) (t|\kappa\xi_0^+|^{-1/\nu})^2 + \dots]$$

Dabei zeigt sich, daß die Koeffizienten der nicht-analytischen t -Terme $t^{-\gamma_{11}}$ und $t^{-\gamma_{11}+1}$ durch Laplace-Transformation aus $C(z) \cdot C(z')$ und $[C(z)D_1(z') + D_1(z)C(z')]$ hervorgehen, so daß ihre ζ -Abhängigkeit eindeutig festgelegt ist

$$A_0(\zeta)A_1(\zeta) = Q_1 \quad (4.36)$$

$$A_0(\zeta)A_3(\zeta) = Q_3 (\nu^{1/\nu} + \nu^{*1/\nu}) \quad (4.37)$$

mit $\nu = \kappa/|\kappa|$, während die Koeffizienten der ganzzahligen t -Potenzen

unbestimmt bleiben. Die Variablen v und $\zeta = \text{Re}(v)$ werden hier und im Folgenden synonym verwendet.

Auf ähnliche Weise kann das Verhalten der Korrelationsfunktion für $t=0$, $p \neq 0$ untersucht werden. Hier lautet das Ergebnis

$$G(p, \kappa, \kappa^*; t=0) = |\kappa|^{-3+\eta} A_0(\zeta)$$

$$\begin{aligned} [1 + B_1(\zeta) \left| \frac{p}{\kappa} \right|^{\eta_{\parallel}-1} + B_2(\zeta) \left| \frac{p}{\kappa} \right|^2 + \\ + B_3(\zeta) \left| \frac{p}{\kappa} \right|^{\eta_{\parallel}+1} + \dots] \end{aligned} \quad (4.38)$$

Auch in diesem Fall ist die ζ -Abhängigkeit der Koeffizienten der nicht-analytischen p -Terme $p^{\eta_{\parallel}-1}$ und $p^{\eta_{\parallel}+1}$ bereits eindeutig festgelegt :

$$A_0(\zeta) B_1(\zeta) = D_1 \quad (4.39)$$

$$A_0(\zeta) B_3(\zeta) = D_3 \frac{1}{2} (v^2 + v^{*2}) \quad (4.40)$$

Das asymptotische Verhalten (4.35) und (4.38) der diffusen Streuintensität wird also von beiden Oberflächenexponenten $\eta_{\parallel}$ und γ_{11} dominiert, die auf diese Weise gemessen werden könnten. Wegen des raschen Zerfalls der Korrelationen in der Oberfläche — für einen skalaren Ordnungsparameter ist $\eta_{\parallel}=1.48$ und $\gamma_{11}=-0.34$ — zeigt der Streuquerschnitt allerdings nur eine relativ schwache cusp-Singularität, d.h. $G(p, \kappa, \kappa^*; t)$ ist endlich bei $t=0$, $p=0$.

Die nächst-führenden Terme in (4.35) und (4.38) werden benötigt,

um Aussagen über den kritischen Bereich machen zu können. Diese Terme können außerdem zu einer Optimierung des Experiments durch Minimierung der Amplituden $A_2(\zeta)$ und $B_2(\zeta)$ der führenden Korrekturterme verwendet werden[†]. Schließlich wäre die experimentelle Verifikation von Exponenten und Amplituden der Korrekturen ein weiterer wertvoller Test für die Gültigkeit der theoretischen Beschreibung kritischer Oberflächenphänomene.

Als nächstes soll die Korrelationsfunktion $G(p, \kappa, \kappa^*; t)$ für $t \rightarrow 0$ bei festem p untersucht werden, d.h. für $tp^{-1/\nu} \ll 1$; dabei ist $p/|\kappa|$ als klein angenommen, so daß für $t=0$ wieder (4.38) gültig ist. Dies entspricht dem Bereich I in Fig. 4.1. Nun muß im Vergleich zu (4.21), (4.25) die Short-Distance Entwicklung nicht nur für kleine Abstände

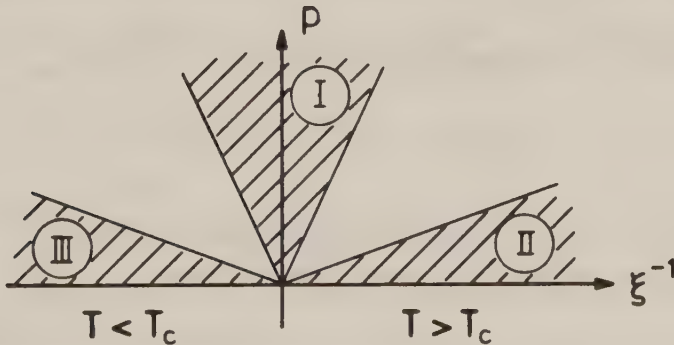


Fig. 4.1: Gültigkeitsbereiche der asymptotischen Entwicklung

[†] Eine Diskussion der kritischen Bereiche und der Optimierung im Rahmen der MF-Theorie ist bei Dietrich und Wagner (1984) zu finden.

z, z' zur Oberfläche, sondern gleichzeitig für kleinen Abstand der beiden Felder (Operator-Produkt Entwicklung) durchgeführt werden. Dazu benötigt man

$$\phi^1(p, z=0) \phi^1(-p, z=0) = E^1(p) \phi^{12}(p=0) + \dots \quad (4.41)$$

Für den Koeffizienten in (4.41) kann man wieder eine homogene RG-Gleichungen ableiten :

$$[\mu \partial_\mu + \beta_u \partial_u - \eta_\phi - \eta_1] E^1(p) = 0 \quad (4.42)$$

deren Lösung am Fixpunkt u^* lautet

$$E^1(p) = \mu^{-(d-1)} \left(\frac{p}{\mu} \right)^{-3+\epsilon+\eta_\phi^*+\eta_1^*} \quad (4.43)$$

Dies führt dann insgesamt zur folgenden Entwicklung

$$\phi(p, z) \phi(-p, z') = C(z)C(z') E^1(p) \phi^{12}(p=0, z=0) + \dots \quad (4.44)$$

Einsetzen von (4.44) in die Korrelationsfunktion $G^{(2,3,0,0)}$ und Integration bezüglich t liefert dann insgesamt

$$G_R(p, \kappa, \kappa^*; t) = A_0 |\kappa|^{-3+\eta} \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned} & \{ 1 + B_1 \left| \frac{p}{\kappa} \right|^{\eta} \}^{-1} [1 + C_1^{(t)} (p\xi)^{-1/\nu} + C_2^{(t)} (p\xi)^{-2/\nu} + \\ & \quad + C_3^{(t)} (p\xi)^{-(2-\alpha)/\nu} + \dots] \\ & + B_2 \left| \frac{p}{\kappa} \right|^2 + B_1^t (|\kappa|\xi)^{-1/\nu} + B_2^t (|\kappa|\xi)^{-2/\nu} + \dots \} \end{aligned}$$

Die Form (4.45) für die Korrelationsfunktion liefert einen vollständigen Überblick über die Abweichungen der Korrelationsfunktion vom asymptotischen Verhalten. Während mit (4.35) Aussagen über die obere Grenze des kritischen Bereichs gemacht werden können, sind mit (4.45) nun auch Abschätzungen für die untere Grenze des kritischen Bereichs möglich. Außerdem erkennt man aus (4.45) unmittelbar, daß das Maximum der Korrelationsfunktion für $t \rightarrow 0$ bei kleinem, aber festgehaltenem $p/|k|$ bei $t=0$ liegt, also nicht wie im Volumen (Fisher und Burford, 1967) verschoben ist. Der Grund dafür ist, daß der Exponent α hier erst in nächst-führender Ordnung auftritt.

Interessanterweise folgt die Form (4.45) für $G_R(p, z, z'; t)$ für $t \rightarrow 0$ auch aus einer Beziehung zwischen Energiedichte und Korrelationsfunktion, die vielleicht ein besseres Verständnis für das Auftreten des Exponenten α der spezifischen Wärme ermöglicht (Fisher und Langer, 1968). Für das Ising-Modell (2.1) ist die Energiedichte $e(z)$ gegeben durch

$$e(z) \sim \frac{1}{N_1 N_2} \sum_{\langle ij \rangle}^{(z)} J_{ij} \langle s_i s_j \rangle \quad (4.46)$$

wobei $N_1 N_2$ die Anzahl der Oberflächenspins angibt. Die Summation in (4.46) ist dabei beschränkt auf Spins, die den Abstand z von der Oberfläche haben. In der Nähe des kritischen Punktes interessieren uns nur Abstände z , die groß gegenüber der Gitterkonstante a_0 sind; (4.46) lautet in diesem Fall

$$e(z) \sim J G(a_0, z, z) \quad (4.47)$$

Aus dem kritischen Verhalten der Energiedichte für $z \rightarrow 0$
(Dietrich und Diehl, 1981; Goldschmidt und Jasnow, 1984; Diehl,
1985)

$$e(z) - e_b = e_1 (tz^{1/\nu}) + e_2 (tz^{1/\nu})^2 + e_3 (tz^{1/\nu})^{2-\alpha} + \dots \quad (4.48)$$

kann man also das Verhalten der Korrelationsfunktion für $r \ll z \ll \xi$
unmittelbar ablesen (e_b bezeichnet wieder den Bulk-Wert). Daraus
ergibt sich aber auch das Verhalten für $r, z, z' \ll \xi$, da $G(r, z, z'; t)$
die Skalenform (2.13) besitzen muß :

$$\begin{aligned} G(r, z, z'; t) = & G(r, z, z'; t=0) + \\ & + (tr^{1/\nu}) \Lambda_{t,1} \left(\frac{z}{r}, \frac{z'}{r} \right) + (tr^{1/\nu})^2 \Lambda_{t,2} \left(\frac{z}{r}, \frac{z'}{r} \right) + \\ & + (tr^{1/\nu})^{2-\alpha} \Lambda_{t,3} \left(\frac{z}{r}, \frac{z'}{r} \right) + \dots \end{aligned} \quad (4.49)$$

in Übereinstimmung mit (4.45).

Das Verhalten der Korrelationsfunktion für $p \rightarrow 0$ bei festem t (Be-
reich II in Fig. 4.1) ist wie im Volumen relativ einfach; man
erwartet eine Entwicklung in der Form einer (analytischen) Potenz-
reihe:

$$\begin{aligned} G(p, \kappa, \kappa^*; t) = & G(p=0, \kappa, \kappa^*; t) + (p/|\kappa|)^2 \Lambda_{p,2}(\kappa, \kappa^*; t) \\ & + (p/|\kappa|)^4 \Lambda_{p,4}(\kappa, \kappa^*; t) + \dots \end{aligned} \quad (4.50)$$

wobei die Funktionen Λ_p ebenfalls durch die Skalenform (2.13) eingeschränkt sind. Für $t \rightarrow 0$ findet man dann

$$G_R(p, \kappa, \kappa^*; t) = A_0 |\kappa|^{-3+\eta} \quad (4.51)$$

$$\{ 1 + A_1 |\kappa \xi|^{Y_{11}/\nu} [1 + C_1^{(p)} (p\xi)^2 + C_2^{(p)} (p\xi)^4 + \dots] + \dots \}$$

Schließlich kann die Short-Distance Entwicklung auch noch dazu verwendet werden, das asymptotische Verhalten der diffusen Streuintensität unterhalb T_c für $p=0$, $t \rightarrow 0^-$ zu bestimmen. Dabei tritt derselbe Koeffizient $C(z)$, Gl. (4.28) auf wie oberhalb T_c :

$$G_R(p=0, z_1, z_2; t) = G_R(p=0, z_1, z_2; t=0) + \\ + C(z_1) C(z_2) G_R^{(0,0,2,0)}(p=0; t) \quad , \quad (4.52)$$

sowohl für $T > T_c$ wie für $T < T_c$. Im Rahmen der c_o^{-1} -Entwicklung (Diehl et al., 1983) ist $G_R^{(0,0,2,0)}(p=0; t)$ proportional zum singulären Anteil der Oberflächensuszeptibilität χ_{11} . Das Verhältnis der Amplituden (für $T > T_c$ und $T < T_c$) der führenden t -Potenz ist daher identisch mit dem universelle Amplitudenverhältnis[†] $[\chi_{11}^{(+)} / \chi_{11}^{(-)}]_{\text{ord}}$.

[†] Die Verwendung der c_o^{-1} -Entwicklung bei der Berechnung universeller Amplitudenverhältnisse wird bei Diehl et al. (1985) ausführlich diskutiert.

4.1.3 Konform-Invarianz

Vor einiger Zeit wurde erkannt, daß Korrelationsfunktionen am kritischen Punkt nicht nur skaleninvariant, sondern auch konform-invariant sind (Polyakov,1970; Wegner,1976). Diese zusätzliche Symmetrie führt zu Einschränkungen in der Form der Korrelationsfunktionen. In zwei Dimensionen sind diese Einschränkungen so stark, daß die kritischen Exponenten und die Zweipunktkorrelationsfunktion exakt berechnet werden können (Belavin et al.,1984; Dotsenko,1984; Friedan et al.,1984,1986).

Zunächst soll plausibel gemacht werden, warum am kritischen Punkt Invarianz unter konformen Transformationen zu erwarten ist[†]. Ausgangspunkt ist ein beliebiges Spin-System auf einem kubischen Gitter mit der Gitterkonstante a und den m Kopplungskonstanten K_α . Die Renormierung bildet dieses System auf ein anderes Spin-System ab , dessen Gitterkonstante a' um den Faktor b größer ist : $a'=ba$. Die Kopplungskonstanten K'_α des neuen Systems hängen von denen des ursprünglichen Systems ab :

$$K'_\alpha = R_\alpha(K_1, \dots, K_m; b) \quad (4.53)$$

Die Funktionen R_α werden durch die Wahl der Renormierungsvorschrift festgelegt. Das Verhalten der Korrelationsfunktionen für große Abstände wird dann vom Fixpunkt der Abbildung (4.53) bestimmt. Korrelationsfunktionen transformieren sich dabei mittels

[†] Diese Betrachtung folgt weitgehend Cardy (1984).

$$\langle \phi_1(\underline{x}_1) \phi_2(\underline{x}_2) \dots \rangle = \prod_i b_i^{-\sigma_i} \langle \phi_1(\underline{x}'_1) \phi_2(\underline{x}'_2) \dots \rangle \quad (4.54)$$

Hier werden die Positionen $\underline{x}_i$ in Einheiten der ursprünglichen Gitterkonstante a gemessen, die $\underline{x}'_i$ in Einheiten der neuen. Bei einer globalen Reskalierung gilt $\underline{x}' = b^{-1} \underline{x}$. Die σ_i in (4.54) sind die kritischen Exponenten, die zum lokalen Spinoperator ϕ_i gehören.

Nun betrachtet man den Fall einer lokalen Reskalierung mit $b=b(\underline{x})$. Da die RG-Transformation lokal ist, sollte (4.54) gültig bleiben, solange die Abbildung $\underline{x} \rightarrow \underline{x}'$ lokal einer Rotation und einer Dilatation entspricht (siehe Fig. 4.2). Eine solche Abbildung ist winkelerhaltend und daher eine konforme Abbildung.

In zwei Dimensionen entspricht jede analytische Funktion einer konformen Transformation. Für allgemeine Dimension d hat die konforme Gruppe jedoch nur eine endliche Anzahl von Generatoren. Zusätzlich zu den homogenen Translationen, Rotationen und Dilatationen

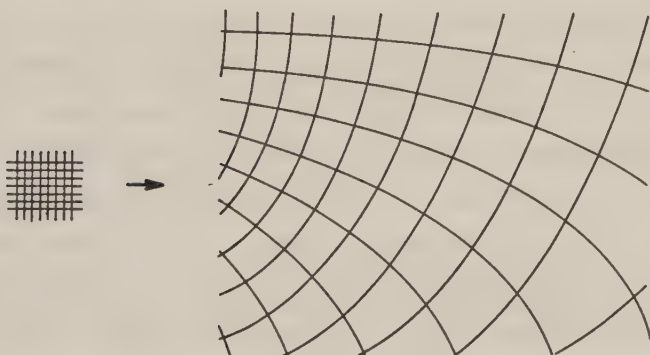


Fig. 4.2: Konforme Abbildung

kommen die speziellen konformen Transformationen mit

$$\frac{x'}{x'^2} = \frac{x}{x^2} + \frac{\hat{a}}{x^2} \quad (4.55)$$

neu hinzu, wobei $\hat{a}$ ein beliebiger, festgehaltener Vektor ist. Die Abbildung (4.55) bildet Hyperkugeln auf Hyperkugeln ab.

Eine spezielle konforme Abb. (4.55) erhält die Oberflächengeometrie für halbunendliche Systeme nur dann, wenn $\hat{a}$ parallel zur Oberfläche liegt. Aus (4.54) ergibt sich dann, daß Skalenfunktion (2.13) der Korrelationsfunktion (2.9) am kritischen Punkt nur noch von einer Variablen abhängt (Cardy, 1984):

$$\Xi(0, \frac{z_1}{r}, \frac{z_2}{r}) \equiv \Omega \left(\frac{r^2 + z_1^2 + z_2^2}{z_1 z_2} \right) \quad (4.56)$$

Im Gegensatz dazu liefert für $d > 2$ die Eigenschaft der Konform-Invarianz im Volumen für die Zweipunkt-Korrelationsfunktion keine über die Renormierungsgruppentheorie hinausgehenden Aussagen; erst die Form der höheren Korrelationsfunktionen wird durch die Konform-Invarianz eingeschränkt. Die Konform-Invarianz hat daher im Volumen keine (mit Röntgen- oder Neutronenstreuung) nachprüf-baren Konsequenzen. Der Grund dafür, daß die Konform-Invarianz in der Nähe der Oberfläche für die Zweipunkt-Korrelationsfunktion und damit — wie im Folgenden gezeigt wird — mittels der Röntgen-streuung meßbare Konsequenzen besitzt, liegt in der Existenz einer zusätzlichen Längenskala: Die Korrelationsfunktion hängt nicht nur vom Abstand $R = (r^2 + (z_1 - z_2)^2)^{1/2}$ der beiden Orte, sondern auch vom 'Spiegel'-Abstand $R' = (r^2 + (z_1 + z_2)^2)^{1/2}$ ab.

Wir wollen nun zeigen, daß die Korrelationsfunktion für das Modell (2.2) in $O(\epsilon)$ tatsächlich die Form (4.56) besitzt und außerdem einen expliziten Ausdruck für die Skalenfunktion Ω gewinnen (Gompper und Wagner, 1985). Der freie Propagator lautet für $T=T_c$ im Ortsraum (Lubensky und Rubin, 1975)

$$G_0(r, z_1, z_2; t=0) = \frac{1}{4} \pi^{-d/2} \Gamma\left(\frac{d-2}{2}\right) \{ [r^2 + (z_1 - z_2)^2]^{(2-d)/2} - [r^2 + (z_1 + z_2)^2]^{(2-d)/2} \} \quad (4.57)$$

mit dem oberen (unteren) Vorzeichen für gewöhnlichen (speziellen) Übergang; Γ bezeichnet die Gamma-Funktion. Der Ausdruck (4.57) hat offensichtlich die Form (4.56).

In 1-loop Näherung erhält man den folgenden Ausdruck für die Korrelationsfunktion :

$$G_1(r, z_1, z_2) = G_0(r, z_1, z_2) - \frac{n+2}{3} \frac{g}{2} \int d^{d-1}r \, e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \int_0^\infty dz \, G_0(p, z_1, z) \, G_0(p, z, z_2) \quad (4.58)$$

$$\int \frac{d^{d-1}q}{(2\pi)^{d-1}} G_0(q, z, z) + O(g^2)$$

In den Integralen in (4.58) treten keine Polterme in ϵ auf, die Integrale können in $d=4$ ausgewertet werden. Das Ergebnis am Fixpunkt lautet

$$G_1(r, z_1, z_2) = C_0(z_1 z_2)^{-1+\epsilon/2} \Omega_1\left(\frac{r^2+z_1^2+z_2^2}{z_1 z_2}\right) \quad (4.59)$$

mit

$$C_0 = (2\pi)^{-2} \left[1 + \frac{\epsilon}{2} (C_E + \ln \pi) - \frac{n+2}{n+8} \epsilon \ln 2 \right] + O(\epsilon^2) \quad (4.60)$$

und

$$\begin{aligned} \Omega_1(x) &= \frac{1}{x-2} + \frac{1}{x+2} \\ &+ \frac{\epsilon}{2} \left[\frac{1}{x-2} \ln(x-2) + \frac{1}{x+2} \ln(x+2) \right] \\ &+ \frac{n+2}{n+8} \frac{\epsilon}{2} \left[\frac{1}{x-2} \ln(x+2) + \frac{1}{x+2} \ln(x-2) \right] + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (4.61)$$

Es kann leicht nachgeprüft werden, daß (4.59) bis (4.61) mit (2.15), dem asymptotischen Verhalten von $E(0, x, x')$ für $x, x' \rightarrow 0$, konsistent ist.

Ohno und Okabe (1985) schließen unabhängig von der Konform-Invarianz, daß die Korrelationsfunktion die Form (4.56) haben sollte und geben die Skalenfunktion bis einschließlich $O(\epsilon^2)$ an.

Unser nächstes Ziel ist es, aus der Form (4.56) der Korrelationsfunktion Folgerungen für die Koeffizienten in (4.38) abzuleiten. Für die Berechnung der Koeffizienten der analytischen p-Terme in (4.38) ist die Kenntnis der Skalenfunktion $\Omega(x)$ für alle $x > 0$ erforderlich. Die Koeffizienten der nicht-analytischen

p-Terme $p_{\parallel}^{\eta \pm 1}$ werden hingegen bereits vom asymptotischen Verhalten von $G(r, z_1, z_2)$ für $r \rightarrow \infty$ bzw. vom asymptotischen Verhalten von $\Omega(x)$ für $x \rightarrow \infty$ bestimmt, vergl. (4.39), (4.40). Die im vorigen Kapitel dargestellte Short-Distance Entwicklung liefert die folgenden Informationen über das asymptotische Verhalten von G:

$$G(r, z_1, z_2) = \bar{A} (z_1 z_2)^{-\sigma} \left(\frac{r^2}{z_1 z_2} \right)^{-\sigma_{\parallel}} \left[1 + \bar{A} \frac{z_1^2 + z_2^2}{r^2} + o\left(\left(\frac{z}{r} \right)^2 \right) \right] \quad (4.62)$$

mit $\sigma = (d-2+\eta)/2$ und $\sigma_{\parallel} = (d-2+\eta_{\parallel})/2$. (4.62) ist nur dann mit der konform-invarianten Form (4.56) verträglich, wenn $\bar{A} = -\sigma_{\parallel}$.

Aus technischen Gründen ist es angenehmer, eine Skalenfunktion zu verwenden, die von der Variablen $y = x+2 = [r^2 + (z_1 + z_2)^2] / (z_1 z_2)$ abhängt. Aus (4.62) ergibt sich dann

$$\Omega(x) \equiv \bar{\Omega}(y) = C \left[y^{-\sigma_{\parallel}} + 2\sigma_{\parallel} y^{-(\sigma_{\parallel}+1)} + o(y^{-(\sigma_{\parallel}+1)}) \right] \quad (4.63)$$

Durch Fourier-Laplace Transformation von $(z_1 z_2)^{-\sigma} \bar{\Omega}(y)$ mit (4.63) und Koeffizientenvergleich mit (4.38) ergibt sich, daß das Verhältnis der Konstanten D_1 , D_3 in (4.39) und (4.40) durch die Konform-Invarianz eindeutig festgelegt ist (Gompper und Wagner, 1985):

$$\frac{D_3}{D_1} = \frac{(\eta_{\parallel} - \eta + 2)(\eta_{\parallel} - \eta + 4)}{4(\eta_{\parallel} + 1)} \quad (4.64)$$

Dieses Relation ist ein Ergebnis, das über die Störungstheorie hinaus gilt und in jeder Ordnung der ϵ -Entwicklung erfüllt sein muß.

Schließlich kann die SDE dazu verwendet werden, eine approximative Form für Ω in $d=3$ am "gewöhnlichen" Übergang zu berechnen. Integration von $G(r, z_1, z_2)$ über r liefert in Polarkoordinaten

$$G(p=0, z_1, z_2) = A (z_1 z_2)^{(1-\eta)/2} g\left(\frac{z_1^2 + z_2^2}{z_1 z_2}\right) \quad (4.65)$$

mit

$$g(x) = \int_0^\infty dr r^{d-2} \Omega(r^2+x) \quad (4.66)$$

Das Integral existiert, da $G(p=0, z_1, z_2)$ am "gewöhnlichen" Übergang endlich bleibt (vergl. Cusp-Singularität bei der Streuung). In $d=3$ ist (4.66) äquivalent zu

$$\Omega(x) = -2 \frac{d}{dx} g(x) \quad (4.67)$$

Aus der SDE erhält man mittels (4.25), (4.28), (4.30), (4.31) für $p=0$ und $z_1 < z_2$ oder $z_2 < z_1$

$$G(p=0, z_1, z_2) = (z_1 z_2)^{(1-\eta)/2} \left[\theta_H(z_1 - z_2) \frac{z_2}{z_1} + \theta_H(z_2 - z_1) \frac{z_1}{z_2} \right]^{(\eta-1)/2} + \dots \quad (4.68)$$

Die Berechnung von $G(p=0, z_1, z_2)$ in der 1-loop Näherung zeigt, daß (4.68) in $O(\epsilon)$ für alle z_1, z_2 gültig ist; dementsprechend ist zu hoffen, daß bei Verwendung von (4.68) für beliebige z_1, z_2 in $d=3$

die Abweichungen vom korrekten Verhalten klein sind. Daraus ergibt sich

$$g(x) = [\sqrt{x+2} - \sqrt{x-2}] \eta_{||}^{-1} + \dots \quad (4.69)$$

und damit

$$\Omega_{d=3}(x) = A(x^2-4)^{-1/2} [\sqrt{x+2} - \sqrt{x-2}] \eta_{||}^{-1} \quad (4.70)$$

Dieses Ergebnis hat große Ähnlichkeit mit dem exakten Ergebnis für Ω in $d=2$ (Cardy, 1984):

$$\Omega_{d=2}(x) = (x^2-4)^{-1/8} [\sqrt{x+2} - \sqrt{x-2}]^{1/2} . \quad (4.71)$$

4.1.4. Der multikritische Punkt

Wenn die Wechselwirkung der Oberflächenspins stärker ist als diejenige der Spins im Volumen, so gelangt man in die Nähe des multikritischen Punktes $c=0$. Die Temperatur- und Winkelabhängigkeit der Streuintensität zeigt dann nicht mehr das in Kap. 4.1.2 gefundene Verhalten, sondern die für den "speziellen" Übergang charakteristischen Singularitäten. Für die Berechnung des asymptotischen Verhaltens der Streuintensität kann dabei auf dieselbe Weise wie beim "gewöhnlichen" Übergang vorgegangen werden.

Man benötigt am multikritischen Punkt die allgemeine Korrelationsfunktion (vergl. (4.22))

$$G_{sp}^{(N,M,L,K)} = \langle \prod_{i=1}^N \phi(\underline{x}_i, z_i) \prod_{j=1}^M \int d\underline{R}_j \phi^2(\underline{R}_j) \prod_{\ell=1}^L \phi(\underline{x}_\ell, z=0) \prod_{k=1}^K \phi^2(\underline{x}_k, z=0) \rangle \quad (4.72)$$

Für $L > 0$ wird für die Renormierung dieser Korrelationsfunktionen ein neuer Z-Faktor Z_1 benötigt, der bei Diehl und Dietrich (1983) einschließlich $O(u^2)$ zu finden ist.

Die renormierten Korrelationsfunktionen

$$G_{sp,R}^{(N,M,L,K)} = Z_\phi^{-\frac{N+L}{2}} Z_\tau^{-M} Z_1^{-\frac{L}{2}} Z_c^{-K} G_{sp}^{(N,M,L,K)} \quad (4.73)$$

erfüllen dann die RG-Gleichung

$$[\mu \partial_\mu + \beta_u \partial_u - (2 + \eta_t) t \partial_t + \frac{N+L}{2} \eta_\phi + M \eta_t + \frac{L}{2} \eta_1^{sp} + K \eta_c] G_{sp,R}^{(N,M,L,K)} = 0 \quad (4.74)$$

mit $\eta_1^{sp} = \mu \partial_\mu \ln Z_1$.

Das singuläre Oberflächenverhalten erhält man wieder aus der Short-Distance Entwicklung. Der führende Beitrag für $z \rightarrow 0$ lautet hier

$$\phi(\underline{p}, z) = C_{sp}(z) \phi(\underline{p}, 0) + \dots \quad (4.75)$$

Der Koeffizient $C_{sp}(z)$ wird durch die RG-Gleichung (vergl. (4.26))

$$[\mu \partial_\mu + \beta_u \partial_u - \eta_1^{sp}] C_{sp}(z) = 0 \quad (4.76)$$

bestimmt. Am Fixpunkt $u=u^*$ ergibt dies

$$C_{sp}(z) = (\mu z)^{(\eta_1^{sp})^*/2} \quad (4.77)$$

mit

$$\eta_{||}^{sp} = \eta + (\eta_1^{sp})^* .$$

Nach dem in Kap.4.1.2 beschriebenen Verfahren erhält man daraus die Temperatur- und Winkelabhängigkeit der Streuintensität für $c=0$:

$$G(p=0, \kappa, \kappa^*; t) = |\kappa|^{-3+\eta} A_1^{sp}(z) (t |\kappa \xi_0^+|^{-1/\nu})^{-\gamma_{11}^{sp}} \quad (4.78)$$

$$G(p, \kappa, \kappa^*; t=0) = |\kappa|^{-3+\eta} B_1^{sp}(z) \left| \frac{p}{\kappa} \right|^{\eta_{||}^{sp}-1} \quad (4.79)$$

Für einen skalaren Ordnungsparameter haben die Oberflächenexponenten $\eta_{||}^{sp}$, γ_{11}^{sp} die Zahlenwerte $\eta_{||}^{sp}=-0.30$ und $\gamma_{11}^{sp}=0.81$; der Zerfall der oberflächennahen Korrelationen ist also langsamer als im Volumen. Im Gegensatz zum "gewöhnlichen" Übergang divergiert daher die Streuintensität für $p=0$ am kritischen Punkt.

Das asymptotische Verhalten der Streuintensität für $t \rightarrow 0$ und $\text{Re}(\kappa) \rightarrow \infty$ kann auch direkt aus (4.3) abgelesen werden; für $p=0$ ergibt sich unmittelbar

$$G(p=0, \kappa, \kappa^*; t) = |\kappa|^{-2} \chi_{11}(t) \quad (4.80)$$

mit $\chi_{11}(t) = G(p=0, z=0, z'=0; t)$. Ein Vergleich mit (4.78) zeigt, daß die beiden Methoden dieselbe Temperaturabhängigkeit, aber eine andere $|\kappa|$ -Abhängigkeit liefern! Der Grund dafür ist, daß die Limites $\Lambda \rightarrow \infty$ und $\text{Re}(\kappa) \rightarrow \infty$ nicht vertauschen: Bei der Entwicklung nach Potenzen von $(\text{Re}(\kappa))^{-1}$ werden Terme proportional $\ln(1+\Lambda/\text{Re}(\kappa))$ nicht mitgenommen, die im Limes $\text{Re}(\kappa) \rightarrow \infty$ singulär werden.

Da eine echte Divergenz im Streuquerschnitt wesentlich leichter zu messen ist als die relativ schwache cusp-Singularität ist hier die Kenntnis der Korrekturterme zum führenden asymptotischen Verhalten weniger wichtig als beim "gewöhnlichen Übergang; diese Korrekturen wurden daher bisher noch nicht berechnet. Sehr interessant ist hingegen das Verhalten der Korrelationsfunktion für $t \rightarrow 0$ bei festem p (Diehl, 1985):

$$G(p, \kappa, \kappa^*; t) = |\kappa|^{-3+\eta} A_1^{\text{sp}}(\zeta) \left| \frac{p}{\kappa} \right|^{\eta^{\text{sp}}-1} \quad (4.81)$$

$$\left[1 + \phi_1^{\text{sp}}(p\xi)^{-1/\nu} + \phi_2^{\text{sp}}(p\xi)^{-(2-\alpha-\nu-\phi_s)/\nu} + \dots \right]$$

Wegen

$$2-\alpha-\nu-\phi_s = 1-\alpha + O(\epsilon^2)$$

besitzt hier die Streuintensität als Funktion der Temperatur möglicherweise wie im Volumen (Fisher und Burford, 1967; Fisher und Aharony, 1974; Anders, 1981; Anders und Stierstadt, 1981) ihr Maximum oberhalb der kritischen Temperatur T_c ; dies hängt vom Vorzeichen der beiden Amplituden ϕ_1^{sp} und ϕ_2^{sp} ab (siehe Kap. 4.2). Aus der Lage des Maximums könnte der Crossover- Exponent ϕ_s bestimmt werden.

4.2. ϵ -Entwicklung

Im letzten Kapitel wurde gezeigt, welches asymptotische Verhalten die Korrelationsfunktion am "gewöhnlichen" und "speziellen" Übergang besitzt. Um einen vollständigen Überblick über die diffuse Streuintensität zu erhalten, werden noch die Amplituden benötigt, die vor den jeweiligen Potenzgesetzen stehen, sowie das Crossover-Verhalten. Diese Informationen bekommt man aus der ϵ -Entwicklung. Darüber hinaus können auf diese Weise die bisher gewonnenen Ergebnisse im Rahmen der Störungsreihe verifiziert werden.

Die Feynman-Diagramme, die bis zur zweiten Ordnung in g zur Korrelationsfunktion beitragen, sind in Fig. 4.3 dargestellt. Beschränkt man sich zunächst auf die erste Ordnung, dann ist die Berechnung der Skalenfunktion Ψ in (4.10) für beliebiges p , t und c möglich. Details dieser Rechnung sind bei Gompper (1984)

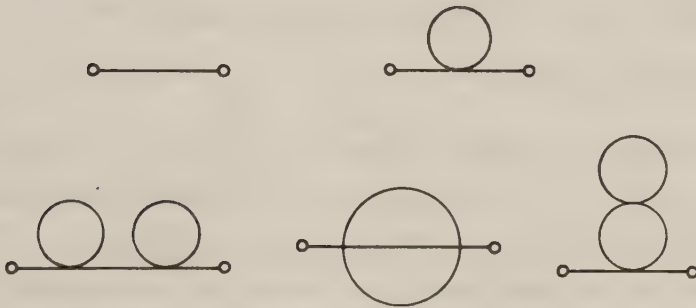


Fig. 4.3: Feynman-Diagramme

angegeben; es ergibt sich folgendes Resultat :

$$\begin{aligned}
 \Psi(|\kappa\xi|, p\xi, \zeta, \hat{c}) &= \left|1 + \frac{\rho}{u\kappa}\right|^{-2} \left\{ \left(\frac{1}{2\zeta} + \frac{x}{\hat{c} + \rho}\right) + \right. \\
 &+ \frac{n+2}{n+8} \varepsilon x \left\{ |N_1|^2 \frac{\hat{c} + \rho}{\hat{c} - \rho} F(\rho) + |N_2|^2 \frac{\hat{c} + \zeta x}{\hat{c} - \zeta x} F(\zeta x) \right. \\
 &\quad \left. - 2 \operatorname{Re} [N_1^* N_2 \frac{2\hat{c} + \rho + u\kappa}{2\hat{c} - \rho - u\kappa} F(\frac{u\kappa + \rho}{2})] \right. \\
 &\quad \left. \left. - 2\hat{c}F(\hat{c}) \left[|N_1|^2 \frac{1}{\hat{c} - \rho} + |N_2|^2 \frac{1}{\hat{c} - \zeta x} - 4 \operatorname{Re} (N_1^* N_2 \frac{1}{2\hat{c} - \rho - u\kappa}) \right] \right\} \right\}
 \end{aligned} \tag{4.82}$$

wobei $\rho = \sqrt{1 + (p\xi)^2}$, $u = \kappa/|\kappa|$, $x = |\kappa\xi|$, $\zeta = \operatorname{Re}(u)$

und

$$N_1 = \frac{1}{u\kappa - \rho} + \frac{1}{\hat{c} + \rho}; \quad N_2 = \frac{1}{u\kappa - \rho}. \tag{4.83}$$

Die Funktion $F(x)$ in (4.82) ist definiert durch

$$F(x) = \sqrt{x^2 - 1} \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}) \tag{4.84}$$

Durch Entwicklung der Skalenfunktion (4.82), beispielsweise für $p \rightarrow 0$ bei $t=0$ und $c=\infty$, und Vergleich mit der ε -Entwicklung der entsprechenden asymptotischen Form der Korrelationsfunktion erhält man dann die gesuchten Amplituden. Wegen der Universalität der Skalenfunktion Ψ sind diese Amplituden ebenfalls universell.

(i) Temperaturabhängigkeit bei $p=0$ am "gewöhnlichen" Übergang :

$$\begin{aligned} \bar{A}_O(\zeta) &:= A_O(\zeta)/D_O = \frac{1}{v+v^*} + \frac{n+2}{n+8} \epsilon \cdot \\ &\quad \cdot \operatorname{Re} \{ v \ln((v+v^*)/v) \} + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (4.85a)$$

$$\bar{Q}_1 := \bar{A}_O(\zeta) A_1(\zeta) = -1 - \frac{n+2}{n+8} \epsilon + O(\epsilon^2) \quad (4.85b)$$

$$\begin{aligned} g_2(\zeta) &= \bar{A}_O(\zeta) A_2(\zeta) \\ &= \frac{v^2+v^{*2}+1}{v+v^*} + \\ &\quad + \frac{n+2}{n+8} \epsilon \frac{1}{2(v+v^*)} \operatorname{Re} \{ 2v^2(v^2+2) \ln((v+v^*)/v) + v^2 \} \end{aligned} \quad (4.85c)$$

$$\begin{aligned} \bar{Q}_3 &:= Q_3/D_O = \\ &= -1 - \frac{5}{12} \frac{n+2}{n+8} \epsilon + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (4.85d)$$

(ii) Winkelabhängigkeit für $T=T_C$ am "gewöhnlichen" Übergang :

$$\begin{aligned} \bar{D}_1 &:= D_1/D_O = \\ &= -1 - \frac{n+2}{n+8} \epsilon (1 - \ln 2) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (4.86a)$$

$$\begin{aligned} f_2(\zeta) &:= \bar{A}_O(\zeta) B_2(\zeta) \\ &= \frac{v^2+v^{*2}+1}{v+v^*} + \\ &\quad + \frac{n+2}{n+8} \epsilon \operatorname{Re} \{ v^3 \ln((v+v^*)/v) + v \ln((v+v^*)/v^*) - \frac{v}{2} \} + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (4.86b)$$

Die Amplitude D_3 wurde ebenfalls berechnet. Das sich damit ergebende Verhältnis D_3/D_1 ist mit dem Ergebnis (4.62) der Konform-Invarianz konsistent.

- (iii) Temperaturabhängigkeit bei festem $p \geq 0$ am "gewöhnlichen" Übergang :

$$C_1^{(t)} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{n+2}{n+8} \epsilon \left(\ln 2 - \frac{1}{2} \right) \quad (4.87a)$$

$$C_2^{(t)} = \frac{3}{4} \frac{1}{4-n} + O(\epsilon) \quad (4.87b)$$

$$C_3^{(t)} = - \frac{n+2}{8(4-n)} + O(\epsilon) \quad (4.87c)$$

Es ist bemerkenswert, daß die Amplituden C_2 , C_3 bereits in nullter Ordnung in ϵ von ihren MF-Werten $1/8$ bzw. 0 abweichen. Andererseits addieren sich die beiden Terme für $\alpha=0$ zum MF-Wert $1/8$. Dies ist analog zu den entsprechenden Termen bei der Volumenstreuung (Fisher und Aharony, 1974).

- (iv) Winkelabhängigkeit bei festem $t \geq 0$ am "gewöhnlichen" Übergang:

$$C_1^{(p)} = \frac{1}{2} - \frac{n+2}{n+8} \epsilon + O(\epsilon^2) \quad (4.88a)$$

$$C_2^{(p)} = - \frac{1}{8} + \frac{1}{2} \frac{n+2}{n+8} \epsilon + O(\epsilon^2) \quad (4.88b)$$

Die Extrapolation der 1-loop Ergebnisses von $C_1^{(p)}$ und $C_2^{(p)}$ nach $d=3$ ist hier relativ unsicher, da der $O(\epsilon)$ -Term für $\epsilon=1$ dieselbe Größenordnung besitzt wie der MF-Beitrag.

(v) Temperaturabhängigkeit bei festem $p \geq 0$ am "speziellen" Übergang:

$$\phi_1^{sp} = -\frac{1}{2} \frac{n+8}{4-n} + O(\epsilon) \quad (4.89a)$$

$$\phi_2^{sp} = +\frac{n+2}{4-n} + O(\epsilon) \quad (4.89b)$$

Da die Amplitude des $t^{2-\alpha-\nu-\phi_s}$ -Terms eine positive Amplitude besitzt (für $n < 4$) und da dieser Term für $t \rightarrow 0$ dominiert, tritt hier die erwartete Maximumverschiebung auf. Wenn man in der Entwicklung (4.81) der Korrelationsfunktion Terme höherer Ordnung in $(p\xi)^{-1/\nu}$ vernachlässigt, dann erhält man für die Lage des Maximums den Ausdruck

$$(p\xi)^{-1/\nu} \Big|_{\max} = \left[-\frac{\phi_2^{sp}}{\phi_1^{sp}} (2-\alpha-\nu-\phi_s) \right]^{1/(\alpha+\nu+\phi_s-1)} \quad (4.90)$$

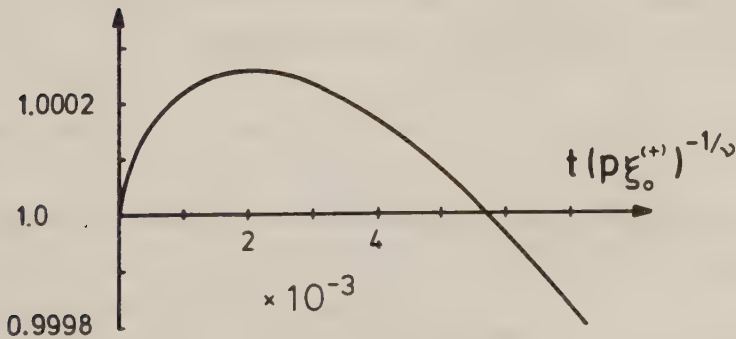


Fig. 4.4: $G(p, \kappa, \kappa^*; t) / G(p, \kappa, \kappa^*; t=0)$ als Funktion der Temperatur für festes p ; $n=1$. ($\phi_1^{sp}=-1.5$, $\phi_2^{sp}=1.0$, $(2-\alpha-\nu-\phi_s)/\nu=0.9215$)

Fig. 4.4 zeigt die Temperaturabhängigkeit der relativen Streuintensität bei festem Impulsübertrag p (und bei festem κ). Sowohl die Verschiebung als auch die relative Höhe des Maximums ist von derselben Größenordnung wie beim entsprechenden Effekt im Volumen (Fisher und Aharony, 1974).

vi) Crossover-Verhalten in der Nähe des "speziellen" Übergangs:

Nähert man sich der kritischen Temperatur bei einem System, dessen Oberflächenkopplungen nur wenig von denen des multi-kritischen Punktes abweichen, so beobachtet man zunächst das für den "speziellen" Übergang charakteristische Verhalten. In der Nähe von $\hat{c} = c / (c_0^+ t^\phi_s) = 1$ findet jedoch ein Crossover zum Verhalten des "gewöhnlichen" Übergangs statt.

Sehr schön zu sehen ist dieses Crossover-Verhalten in der Überschußsuszeptibilität χ_s , die in der Streuintensität im Grenzfall (4.18) beobachtet werden kann. Aus (4.82) kann man für $p=0$, $\text{Im}\kappa=0$ und $\kappa \rightarrow 0$ direkt ablesen :

$$\chi_s = D_s t^{-\gamma_s}$$

$$\left\{ \frac{\hat{c}}{1+\hat{c}} - \frac{n+2}{n+8} \pm \left[\pi \left(\frac{\hat{c}(2\hat{c}+1)}{(\hat{c}+1)(2\hat{c}-1)} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{2} \right) - 2F(\hat{c}) \frac{\hat{c}^2 - \hat{c} + 1}{(2\hat{c}-1)(\hat{c}+1)^2(\hat{c}-1)} \right] \right\} \quad (4.91)$$

$$\text{mit } D_s = 1 + \frac{3}{4}(1-C_E) \frac{n+2}{n+8} \epsilon + O(\epsilon^2) \quad (4.92)$$

Da der Exponent γ_s am "speziellen" und am "gewöhnlichen" Übergang denselben Zahlenwert besitzt, findet der Crossover ausschließlich in der Amplitude statt. Die Crossover-Funktion $\hat{\chi}_s = \chi_s t^{\gamma_s} / D_s$ ist in Fig. 4.5 dargestellt. Die Crossover-Funktionen von χ_{11} und χ_1 wurden von Goldschmidt (1983) und von Nemirovsky und Freed (1985) berechnet.

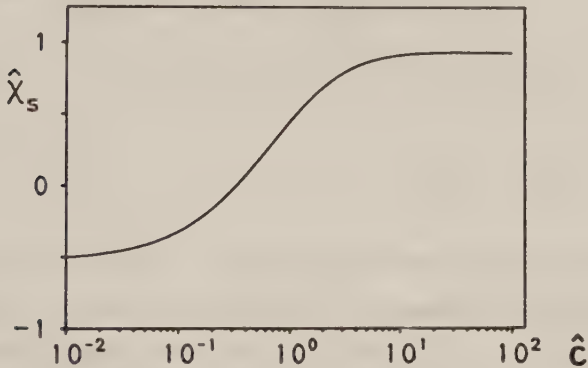


Fig. 4.5: Skalenfunktion der Überschuß-Suszeptibilität χ_s für $n=1$, $\epsilon=1$.

vii) Universelle Amplitudenverhältnisse:

Für die in der diffuse Streuintensität auftretenden Amplitudenverhältnisse liefert die ϵ -Entwicklung folgende Ergebnisse (Diehl et al., 1985):

$$[\chi_s^{(+)} / \chi_s^{(-)}]_{\text{ord}} = - \frac{4\sqrt{2}}{3} (1 - 0.15\epsilon) + O(\epsilon^2) \quad (4.93a)$$

$$[\chi_{11}^{(-)}/\chi_{11}^{(+)}]_{\text{ord}} = 0.32\epsilon + O(\epsilon^2) \quad (4.93b)$$

$$[\chi_s^{(+)}/\chi_s^{(-)}]_{\text{sp}} = -4\sqrt{2} \epsilon^0 + O(\epsilon) \quad (4.93c)$$

$$[\chi_{11}^{(+)}/\chi_{11}^{(-)}]_{\text{sp}} = \sqrt{2} (1 + 0.56 \epsilon) + O(\epsilon^2) \quad (4.93d)$$

$$\chi_{s,\text{ord}}^{(+)} / (\chi_b^{(+)} \xi_o^{(+)}) = - [1 - \frac{n+2}{n+8} \epsilon \pi (\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{2})] + O(\epsilon^2) \quad (4.94a)$$

$$\chi_{s,\text{ord}}^{(-)} / (\chi_b^{(-)} \xi_o^{(-)}) = \frac{3}{2} (1 + 0.94\epsilon) + O(\epsilon^2) \quad (4.94b)$$

$$\chi_{s,\text{sp}}^{(+)} / (\chi_b^{(+)} \xi_o^{(+)}) = \frac{n+2}{n+8} \epsilon \frac{\pi}{2} + O(\epsilon^2) \quad (4.94c)$$

Einige dieser Amplitudenverhältnisse sind in Fig. 4.6 und Fig. 4.7 als Funktion der Dimension d dargestellt, wobei für $d < 4$ die Ergebnisse der ϵ -Entwicklung linear extrapoliert wurden, zusammen mit den Monte Carlo Resultaten von Landau (1976a,b), Kikuchi und Okabe (1985), und Okabe et al. (1986). Da es sich um $O(\epsilon)$ -Ergebnisse handelt, ist eine perfekte Übereinstimmung in $d=3$ (und erst recht in $d=2$) mit den Monte Carlo Ergebnissen nicht zu erwarten. Wenn man berücksichtigt, daß die ϵ^2 -Beiträge durchaus von der gleichen Größenordnung sein können wie die ϵ -Beiträge (wie etwa in Kap.5.2 gezeigt wurde), und außerdem beachtet, daß auch die Monte Carlo Daten noch mit einer großen Unsicherheit behaftet sind, dann scheinen die beiden Methoden konsistente Ergebnisse in $d=3$ zu liefern.

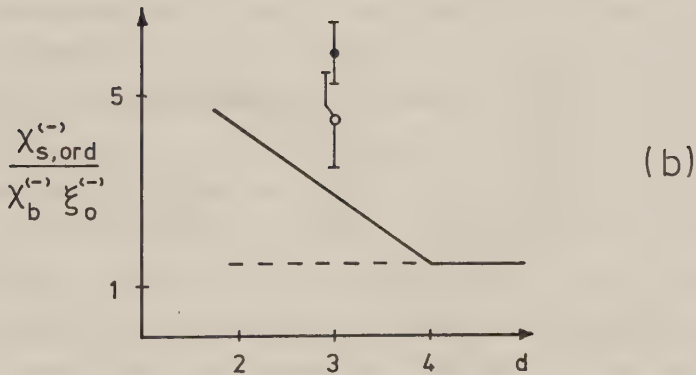
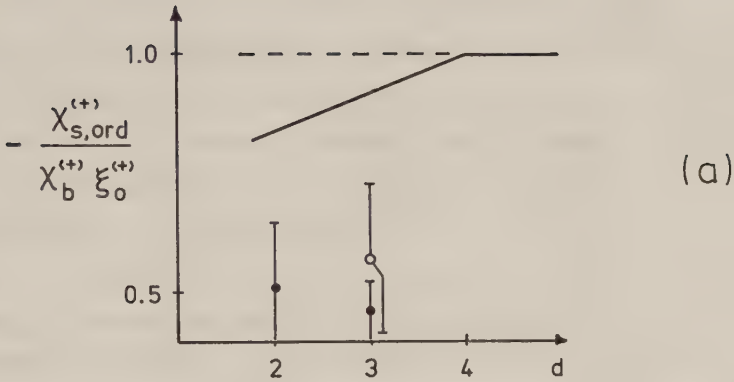


Fig. 4.6: Die universellen Amplitudenverhältnisse $\chi_{s,ord}^{(+)} / (\chi_b^{(+)} \xi_o^{(+)})$ (a) und $\chi_{s,ord}^{(-)} / (\chi_b^{(-)} \xi_o^{(-)})$ (b) als Funktion der Raumdimension d . Die geraden Linien für $d \leq 4$ sind Extrapolationen der ϵ -Entwicklung (4.94a) und (4.94b). Die Punkte stellen die MC-Ergebnisse von Landau (1976a,b) (•) und Okabe et al. (1986) (o) dar (die Bulk-Amplituden $\xi_o^{\pm}$ und $\chi_b^{(\pm)}$ sind Tarko und Fisher (1975) entnommen).

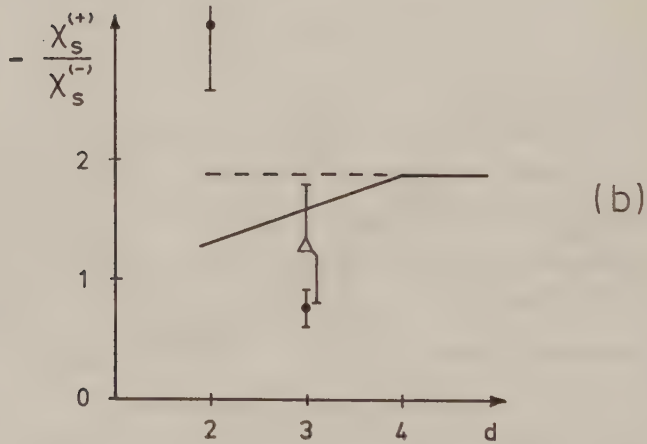
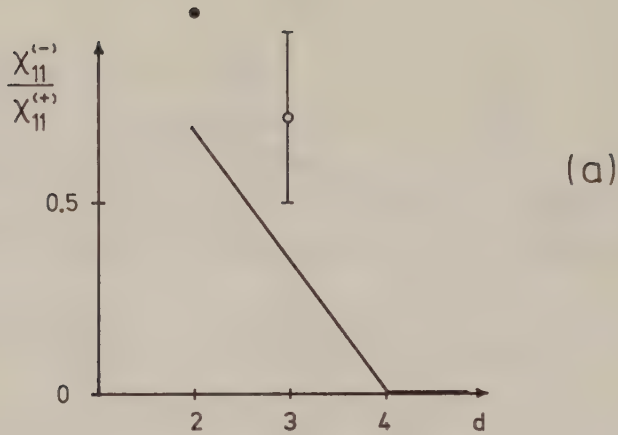


Fig. 4.7: Die universellen Amplitudenverhältnisse $(\chi_{11}^{(-)}/\chi_{11}^{(+)})_{\text{ord}}$ (a) und $(\chi_s^{(+)} / \chi_s^{(-)})_{\text{ord}}$ (b) als Funktion der Raumdimension d . Die geraden Linien für $d \leq 4$ sind Extrapolationen der ϵ -Entwicklung (4.93b) und (4.93a). Die Punkte in $d=3$ stellen die MC-Ergebnisse von Kikuchi und Okabe (1985) (o) Landau (1976a,b) (•) und Okabe et al. (1986) (Δ) dar. In $d=2$ ist $(\chi_{11}^{(-)}/\chi_{11}^{(+)})_{\text{ord}}$ exakt bekannt (McCoy und Wu, 1967) 1967).

Die Berechnung der kritischen Exponenten mittels ϵ -Entwicklung zeigt, daß für dreidimensionale Systeme erst dann eine quantitative Übereinstimmung mit den Ergebnissen anderer Methoden erreicht wird, wenn man die $O(\epsilon^2)$ -Beiträge mitnimmt. Es ist daher zu erwarten, daß für eine präzise Vorhersage der Amplituden ebenfalls bis zur zweiten Ordnung in ϵ gerechnet werden muß.

Da die Auswertung der 2-loop Diagramme in Fig. 5.3 einen wesentlich höheren Aufwand erfordert als die des 1-loop Graphen, beschränken wir uns im Folgenden auf den "gewöhnlichen" Übergang, der im Experiment die Regel sein sollte, und bei dem die Kenntnis der Korrekturterme besonders wichtig ist. Außerdem werden nur die beiden Grenzfälle $p=0, t \rightarrow 0$ und $t=0, p \rightarrow 0$ betrachtet, um den Rechenaufwand in erträglichen Grenzen zu halten.

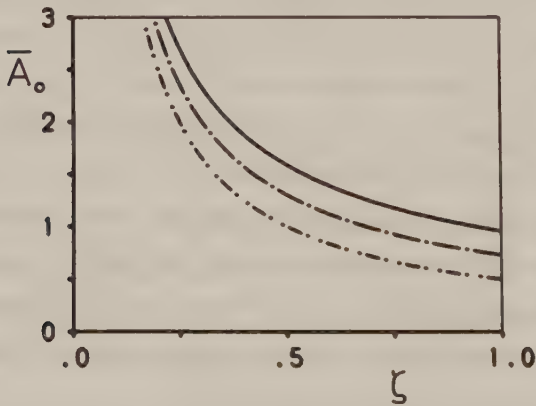
Die analytischen Ausdrücke für die Amplituden $A_0, \dots, A_3$ und $B_1, \dots, B_3$ in (4.35) und (4.38), die sich in $O(\epsilon^2)$ ergeben, sind bei Gompper (1986) angegeben. Obwohl diese Ausdrücke von großer praktischer Bedeutung sind, ist ihre algebraische Form zu kompliziert, um aus ihr direkt etwas ablesen zu können. Daher wurden die Amplituden $\bar{A}_0 = A_0/D_0$, $g_2 = \bar{A}_0 A_2$ und $f_2 = \bar{A}_0 B_2$, die Funktionen von α_i und α_f sind, numerisch ausgewertet; sie sind für den Fall $n=1$ (Ising-Modell) und $d=3$ in Fig. 4.8 gezeigt. Für die übrigen Amplituden ist die ζ -Abhängigkeit exakt bekannt — vergl. (4.36), (4.37) und (4.39), (4.40) — so daß hier nur die Konstanten Q_1, Q_3 und D_1, D_3 aus der ϵ -Entwicklung bestimmt werden müssen. Für $n=1$ erhält man

$$\bar{Q}_1 = - (1 + 0.333...\epsilon + 0.265...\epsilon^2 + O(\epsilon^3)) \quad (4.95a)$$

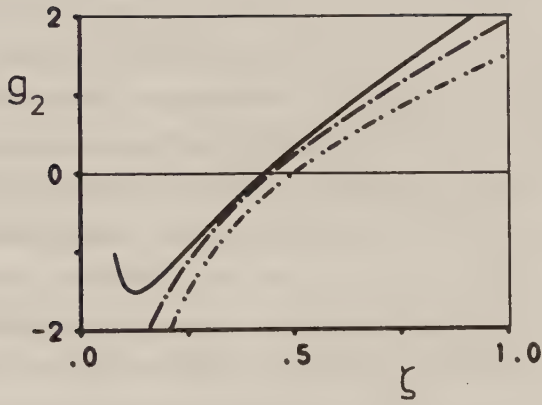
$$\bar{Q}_3 = - (1 + 0.139...\epsilon - 0.013...\epsilon^2 + O(\epsilon^3)) \quad (4.95b)$$

$$\bar{D}_1 = - (1 + 0.102...\epsilon + 0.212...\epsilon^2 + O(\epsilon^3)) \quad (4.96)$$

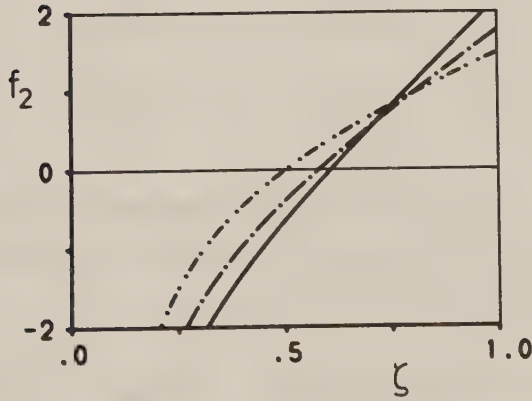
Das Amplitudenverhältnis D_3/D_1 ist auch in $O(\epsilon^2)$ konsistent mit dem Ergebnis (4.64) aus der Konform-Invarianz. Es ist bemerkenswert, daß sowohl bei den Funktionen $\bar{A}_0$, g_2 und f_2 als auch bei den Konstanten $\bar{Q}_1$, $\bar{Q}_3$ und $\bar{D}_1$ der ϵ^2 -Beitrag in $d=3$ beinahe genauso groß ist wie der ϵ -Beitrag !



(a)



(b)



(c)

Fig. 4.8: Die Amplituden $\bar{A}_0$ (a), $g_2 = \bar{A}_0 A_2$ (b) und $f_2 = \bar{A}_0 B_2$ (c) als Funktion von $\zeta = \text{Re}(\nu)$ in Mean-field- (.....), 1-loop- (-----) und 2-loop-Näherung (durchgezogene Kurve), für $n=1$ und $d=3$.

4.3 Diskussion der diffusen Streuintensität

Ein Blick auf die in Fig. 4.8 gefundene ζ -Abhängigkeit der Amplituden der führenden Korrekturterme in der Temperatur- und Winkelabhängigkeit der Streuintensität zeigt, daß diese Funktionen beide eine Nullstelle besitzen. Dieser Umstand erweist sich als äußerst günstig für die Bestimmung der Oberflächenexponenten η und γ_{11} : durch geeignete Wahl von Einfallswinkel α_i, α_f kann der führende Korrekturterm zum Verschwinden gebracht und damit ein großer kritischer Bereich erzielt werden. Die 2-loop Näherung für f_2 und g_2 ergibt die folgenden Zahlenwerte für diese Nullstellen :

$$\zeta_t = 0.430 \quad \text{für } p = 0, \quad t \rightarrow 0 \quad (4.97a)$$

$$\zeta_p = 0.608 \quad \text{für } T = T_c, \quad p \rightarrow 0 \quad (4.97b)$$

Für $\alpha_f < \alpha_c$ bedeutet dies in beiden Fällen $\alpha_i > \alpha_c$!

Für die Diskussion des Wirkungsquerschnitts definieren wir die normierte Streuintensität

$$\hat{S}(p, \kappa, \kappa^*) := G_R(p, \kappa, \kappa^*) / G_R(p=0, \kappa, \kappa^*) \big|_{T=T_c} \quad (4.98)$$

und die "natürlichen" Variablen

$$\hat{t} = t |\kappa \zeta_0^\pm|^{-1/\nu} \quad \text{und} \quad \hat{\varphi} = \frac{p}{\kappa} \quad (4.99)$$

Wenn die Streugeometrie (d.h. α_i und α_f) optimal gewählt wird entsprechend (4.97a,b), dann ergibt sich die in Fig. 4.9 und 4.10 dargestellte Temperatur- und Winkelabhängigkeit von $\hat{S}$. Zusätzlich zu dem von Gl.(4.35) und (4.38) beschriebenen Verhalten ist auch das führende kritische Verhalten angegeben. Für die experimentelle Bestimmung der Oberflächenexponenten sollte $(1-\hat{S})$ doppellogarithmisch aufgetragen werden, wie dies in Fig. 4.11 und Fig. 4.12 gezeigt ist.

Der Vergleich der beiden Kurven in diesen Diagrammen ermöglicht die Bestimmung des kritischen Bereichs : die Korrekturen sollten dort weniger als $\Delta \ll 1$ zu $(1-\hat{S})$ beitragen. Aus (4.35) und (4.38) kann man sofort ablesen, daß dies den oberen Grenzen

$$\hat{t}_{\max} = \Delta \cdot \frac{A_1}{A_3} = \Delta \cdot \frac{Q_1}{Q_3} (v^{1/v} + v^{*1/v})^{-1} \quad (4.100)$$

$$\hat{\varphi}_{\max} = \sqrt{\Delta \frac{B_1}{B_3}} = \sqrt{\Delta \frac{D_1}{D_3}} (v^2 + v^{*2})^{-1/2} \quad (4.101)$$

der kritischen Bereiche entspricht (bei verschwindendem führendem Korrekturterm !).

Ein scharfer p-cusp ist nur direkt am kritischen Punkt zu beobachten, bei endlicher Temperaturentauung δt wird hingegen die Spitze abgerundet sein. Dies führt zu einer Begrenzung des kritischen Bereichs für kleines $\hat{\varphi}$. Aus (4.45) ergibt sich für diese untere Grenze

$$\hat{\varphi}_{\min} = \left(\frac{C_1^{(t)}}{\Delta} \right)^v \hat{t}^v \quad (4.102)$$

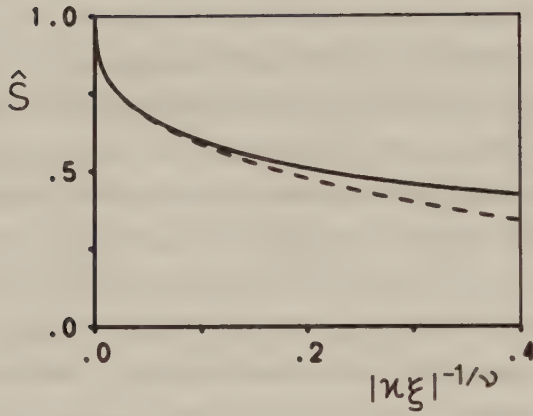


Fig. 4.9: Temperaturabhängigkeit der normierten Streuintensität
für $p=0$, bei $\zeta=\zeta_t=0.430$.

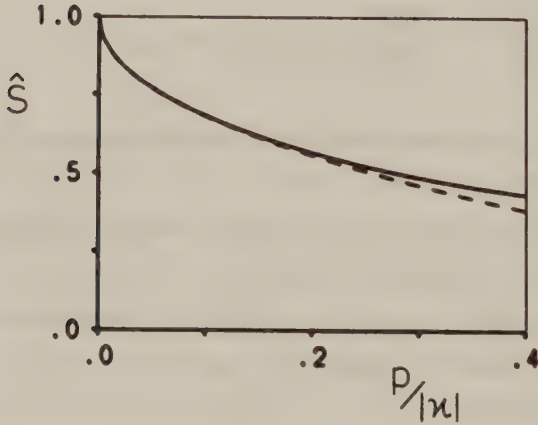


Fig. 4.10: Winkelabhängigkeit der normierten Streuintensität
für $t=0$, bei $\zeta=\zeta_p=0.608$.

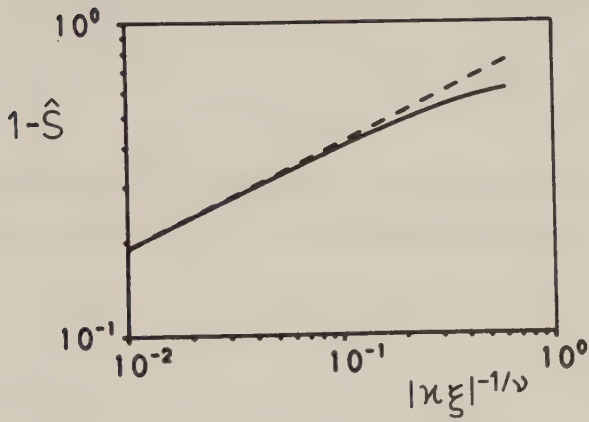


Fig. 4.11: Temperaturabhängigkeit von $(1-\hat{S})$ für $p=0$, bei $\zeta=\zeta_t=0.430$.

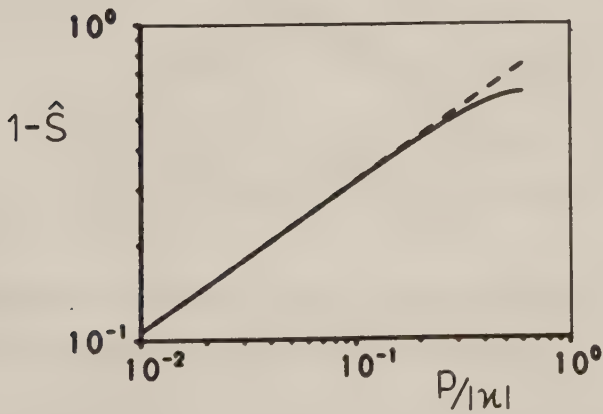


Fig. 4.12: Winkelabhängigkeit von $(1-\hat{S})$ für $T=T_c$, bei $\zeta=\zeta_p=0.608$.

Ebenso erhält man aus den Abweichungen vom t-cusp für endliche Winkelauflösung $\delta\varphi$ aus (4.51) die untere Grenze

$$\hat{t}_{\min} = \left(\frac{C_1^{(p)}}{\Delta} \right)^{1/(2\nu)} \hat{\varphi}^{1/\nu} \quad (4.103)$$

Die kritischen Bereiche in der $(\hat{t}, \hat{\varphi})$ -Ebene, die sich aus den MF-, 1-loop- und 2-loop-Rechnungen ergeben, sind in Fig. 4.13 dargestellt.

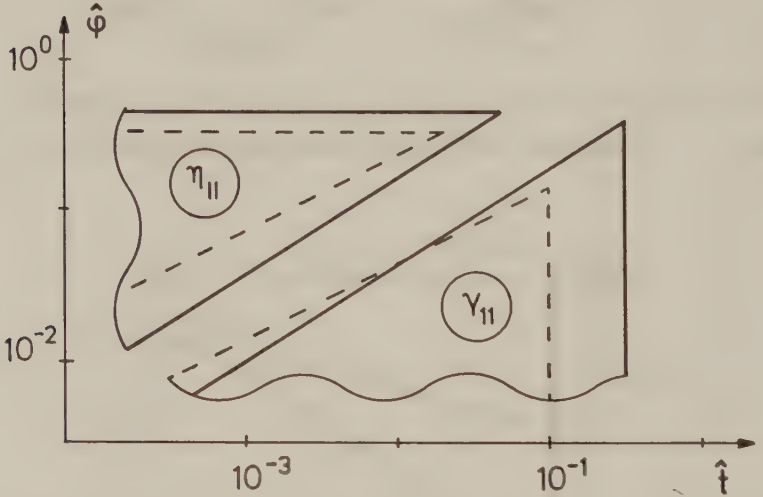


Fig. 4.13: Kritische Bereiche in der $(\hat{t}, \hat{\varphi})$ -Ebene. Die gestrichelten Linien geben die Grenzen in MF-Näherung an, die durchgezogenen Linien zeigen die 1-loop- (bzw. 2-loop-) Ergebnisse. ζ ist dabei für die oberen Grenzen jeweils so gewählt, daß der führende Korrekturterm verschwindet.

Die Umrechnung von $\hat{t}, \hat{\varphi}$ in die physikalischen Größen t, φ (wobei der Winkel φ durch $p=K|\varphi|$ definiert ist, siehe Fig. 3.3) ergibt schließlich für $\alpha_f < \alpha_c$ und $\alpha_i > \alpha_c$:

$$t_{\max} = \hat{t}_{\max} \left[\frac{\xi_0^+}{\ell_0} \zeta_t^{-1} \sqrt{1-x_f^2} \right]^{1/\nu} \quad (4.104)$$

$$\frac{\varphi_{\max}}{\alpha_c} = \hat{\varphi}_{\max} \zeta_p^{-1} \sqrt{1-x_f^2} \quad (4.105)$$

$$t_{\min} = \left(\sqrt{\frac{C_1^{(p)}}{\Delta}} \frac{\xi_0^+}{\ell_0} \right)^{1/\nu} \left(\frac{\delta \varphi}{\alpha_c} \right)^{1/\nu} \quad (4.106)$$

$$\frac{\varphi_{\min}}{\alpha_c} = \left(\frac{C_1}{\Delta} \right)^{\nu} \frac{\ell_0}{\xi_0^+} (\delta t)^{\nu} \quad (4.107)$$

mit $x_f = \frac{\sin \alpha_f}{\sin \alpha_c}$ und der minimalen Eindringtiefe $\ell_0 = (K\alpha_c)^{-1}$. Für

Fe_3Al mit

$$\xi_0^+ = 1.2 \text{ \AA}$$

$$\alpha_c = 27 \text{ mrad} \quad (\text{bei } K=0.93 \text{ \AA}^{-1})$$

$$\ell_0 = 40 \text{ \AA}$$

und unter den Annahmen

$$x_f = 0.5, \quad \Delta = 0.1, \quad \delta = 0.3 \text{ mrad}, \quad \delta t = 10^{-5}$$

erhält man die Zahlenwerte

$$\begin{aligned}\varphi_{\min} &= 1.9 \text{ mrad} \\ \varphi_{\max} &= 17 \text{ mrad} \\ t_{\min} &= 4.5 \cdot 10^{-6} \\ t_{\max} &= 3.7 \cdot 10^{-3} .\end{aligned}\tag{4.108}$$

Die Information, die in der Kenntnis der Korrekturen zum führenden kritischen Verhalten steckt, wird mit der obigen Abschätzung der Größe der kritischen Bereiche nur in geringem Maße genutzt. Die Abweichung der Streuintensität vom asymptotischen Verhalten kann nämlich nun bei der Messung der Oberflächenexponenten berücksichtigt werden. Damit wird der nutzbare Temperatur- und Winkelbereich größer, als die Abschätzung (4.108) angibt.

Man beachte insbesondere, daß beim p-cusp die Abweichungen vom asymptotischen Verhalten (für die hier diskutierte Wahl (4.97b) von ζ) durch den Term $p_{\parallel}^{\eta+1}$ bestimmt werden, dessen Amplituden vollständig durch die Konform-Invarianz festgelegt ist.

5. Bragg-Streuung: Ordnungsparameter-Profil für $T < T_c$

In Kap.3 wurde gezeigt, daß die Intensität der Überstruktur-Reflexe einer binären Legierung bis auf Konstanten durch

$$I_B := \left| \int_0^{\infty} dz e^{-\bar{\kappa}z} \langle \phi(z) \rangle \right|^2 \quad (5.1)$$

gegeben ist (vgl. (3.32)), wobei hier wiederum die Variable $\bar{\kappa} = -i\kappa$ verwendet wird (im Folgenden $\bar{\kappa}$ auch wieder ohne Querstrich). Ziel dieses Kapitels ist es, aus der Renormierungsgruppentheorie Aussagen über das Profil $\langle \phi(z) \rangle$ und damit über die Intensität (5.1) zu gewinnen.

5.1. Das Ordnungsparameterprofil[†]

Unterhalb der kritischen Temperatur T_c ist die Symmetrie spontan gebrochen, der Ordnungsparameter $\langle \phi(\underline{r}, z) \rangle = m(z)$ verschwindet nicht mehr. Es erweist sich als sehr vorteilhaft, ein neues Feld ψ einzuführen

$$\phi(\underline{r}, z) = m(z) + \psi(\underline{r}, z) \quad , \quad (5.2)$$

[†] Die Berechnung von OP-Profilen in 1-loop Näherung wird für verschiedene Fälle in den Arbeiten von Wilson (1980), Leibler und Peliti (1982), Rudnick und Jasnow (1982), Brezin und Leibler (1983), Diehl und Dietrich (1983), Peliti und Leibler (1983), Gompper (1984) und Diehl et al. (1985) beschrieben.

dessen Mittelwert verschwindet :

$$\langle \psi(\underline{r}, z) \rangle = 0 \quad (5.3)$$

Die Fluktuationen von ψ werden vom Hamiltonian

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\{\psi\} = & \int_0^\infty dz \int d^{d-1}r \left\{ \frac{1}{2} (\Delta\psi)^2 + \frac{\tau}{2} \psi^2 + \frac{g}{4!} \psi^4 \right. \\ & + (-\partial_z^2 m + \tau m + \frac{g}{6} m^3) \psi + \frac{g}{3!} m \psi^3 \\ & \left. + \delta(z) (c_0 m - \partial_z m) \psi \right\} \end{aligned} \quad (5.4)$$

beschrieben, den man durch Einsetzen von (5.2) in (2.2) und Entwickeln bis zur vierten Ordnung in ψ erhält. Aus der Bedingung (5.3) ergibt sich dann das Ordnungsparameterprofil $m(z)$.

In 1-loop Näherung erfüllt das "nackte" Profil $m(z)$ die Differentialgleichung

$$\left[-\partial_z^2 - |\tau| + \frac{g}{6} m^2(z) + \frac{g}{2} Q_O^L(z) + \frac{n-1}{3} \frac{g}{2} Q_O^T(z) \right] m(z) = 0 \quad (5.5)$$

mit der Randbedingung

$$\partial_z m|_{z=0} = c_0 m(z=0) \quad . \quad (5.6)$$

Hier bezeichnet Q_O^L und Q_O^T die Integrale

$$Q_0^{L,T}(z) = \int \frac{d^{d-1}q}{(2\pi)^{d-1}} G_{L,T}(p, z, z'; \{m\}) \quad , \quad (5.7)$$

wobei der longitudinale und der transversale Propagator $G_{L,T}$ durch die Gleichungen

$$[-\partial_z^2 + p^2 - |\tau| + \frac{g}{2} m^2(z)] G_L(p, z, z'; \{m\}) = \delta(z-z') \quad (5.8)$$

$$[-\partial_z^2 + p^2 - |\tau| + \frac{g}{6} m^2(z)] G_T(p, z, z'; \{m\}) = \delta(z-z') \quad (5.9)$$

mit der Randbedingung

$$\partial_z G_{L,T}|_{z=0} = c_0 G_{L,T}|_{z=0} \quad (5.10)$$

bestimmt sind.

Um (5.5) zu lösen macht man den Ansatz

$$m(z) = m_0(z) + g \cdot m_1^L(z) + \frac{n-1}{3} g \cdot m_1^T(z) + \dots \quad (5.11)$$

und analog für $G_{L,T}$. Es zeigt sich dann, daß für die Berechnung des 1-loop Anteils von $m(z)$ in (5.8), (5.9) das MF-Ergebnis für m ausreichend ist. Einsetzen von (5.11) in (5.5) ergibt inhomogene Differentialgleichungen für m_1^L und m_1^T . Die Green'sche Funktion für diese Gleichungen ist der longitudinale Propagator $G_L^{(0)}(p=0, z, z'; \{m_0\})$, so daß man sofort erhält

$$m_1^{L,T}(z) = -\frac{1}{2} \int_0^{\infty} dz' Q_O^{L,T}(z') m_O(z') G_L^{(0)}(p=0, z, z'; \{m_O\}) \quad (5.12)$$

Die MF-Größen m_O und $G_L^{(0)}$ sind für alle $c_O \geq 0$ bekannt (Brezin et al., 1983). Der transversale MF-Propagator für $c_O = \infty$ lautet (Gompper, 1984)

$$G_T^{(0)}(p, z, z', \{m_O\}) = \sqrt{2/|\tau|} \frac{1}{\omega_p (\omega_p^2 - 1)} e^{-\omega_p y} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} & \Theta_H(y-y') [\omega_p + \tanh y] [\omega_p \sin \omega_p y' - \tanh y' \cosh \omega_p y'] \\ & + [y_+^* y'] \end{aligned}$$

$$\text{mit } \omega_p = p/\sqrt{|\tau|/2} \quad \text{und } y = z \sqrt{|\tau|/2}.$$

Für $c_O=0$ und $c_O=\infty$ enthält das "nackte" Profil (5.12) Polterme in ϵ , die verschwinden, wenn man die "nackten" Größen ϕ , τ und g durch die renormierten ausdrückt. Am Fixpunkt $u=u^*$ kann das renormierte Profil dann in folgender Form geschrieben werden :

$$m_R(z) = m_b \sigma_{ord/sp}(z/2\xi) \quad . \quad (5.14)$$

Wir wollen hauptsächlich $n=1$ betrachten, da dieser Fall für die Streuung an binären Legierungen benötigt wird.

Das Ergebnis für die Skalenfunktion $\sigma_{ord}(x)$ am "gewöhnlichen" Übergang lautet

$$\sigma_{\text{ord}}^{(0)}(x) = \sigma^{(0)}(x) + \varepsilon \sigma_{\text{ord}}^{(1)} + O(\varepsilon^2) \quad (5.15a)$$

mit

$$\sigma_{\text{ord}}^{(0)}(x) = \tanh x \quad (5.15b)$$

und

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{ord}}^{(1)}(x) = & \frac{1}{3} \left\{ \frac{1}{4} (\pi\sqrt{3} - \frac{11}{2}) x \operatorname{sech}^2 x - \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \tanh x \operatorname{sech}^2 x + \right. \\ & \left. + \int_0^\infty dz' R_L(x') \tanh(x') |t| G_L^{(0)}(0, z, z'; \{m_0\}) \right\} \end{aligned} \quad (5.15c)$$

wobei

$$\begin{aligned} R_L(x) = & 9 \tanh^2 x [I(x) (1 + \tanh^2 x) - I'(x) \tanh x] + \\ & + 3K_0(4x) (1 + 5 \tanh^2 x) + 12 K_1(4x) \tanh x + \frac{1}{x} K_1(4x) \end{aligned} \quad (5.16)$$

Hierbei bezeichnen K_0 und K_1 modifizierte Besselfunktionen; $I(x)$ ist definiert durch

$$I(x) := \int_0^\infty dq \frac{\exp[-2x(q^2+4)^{1/2}]}{(q^2+4)^{1/2} (q^2+3)} \quad (5.17)$$

Das Verhalten von $\sigma_{\text{ord}}(x)$ für $x \rightarrow 0$, das man in der 1-loop-Näherung (5.15) findet, ist konsistent mit der Form, die sich aus der Short-Distance-Entwicklung (und teilweise aus Gl. (2.14)) ergibt:

$$\sigma_{\text{ord}}(x) = \tilde{C}_1 x^{(\beta_1^{\text{ord}} - \beta)/\nu} - \tilde{C}_2 x^{(\beta_1^{\text{ord}} - \beta + 1)/\nu} + \dots \quad (5.18)$$

Da die Skalenfunktion σ_{ord} universell ist, sind selbstverständlich auch C_1 und C_2 universell. Aus dem 1-loop Ergebnis kann man ablesen

$$\tilde{C}_1 = 1 - \frac{\epsilon}{6} \left[\frac{3}{4} - \frac{\pi}{2\sqrt{3}} + \ln 2 + C_E - 3I(0) \right] + O(\epsilon^2) \quad (5.19a)$$

$$\tilde{C}_2 = \frac{1}{3} \left\{ 1 + \frac{\epsilon}{2} \left[I(0) - C_E - \ln 2 + \frac{1}{36} + \frac{\pi}{6\sqrt{3}} \right] \right\} + O(\epsilon^2) \quad (5.19b)$$

Für $x \rightarrow \infty$ nähert sich $\sigma(x)$ exponentiell dem Volumenwert.

Das Profil für $n \geq 2$ ist bei Gompper (1984) angegeben. Man findet in diesem Fall ebenfalls das durch (2.14) beschriebene führende Short-Distance Verhalten. Es können hier allerdings im Gegensatz zu (5.18) mehrere Operatoren mit derselben kanonischen Dimension zum führenden Korrekturterm beitragen. Interessant ist das Verhalten für große x . Aufgrund der Goldstone-Moden erfolgt die Annäherung an den Volumenwert für $n \geq 2$ mit einem Potenzgesetz. Die ϵ -Entwicklung liefert

$$\sigma_{\text{ord}}(x) = 1 - \frac{\epsilon}{8} \frac{n-1}{n+8} x^{-2} + \dots \quad (5.20)$$

Für das nicht-lineare σ -Modell, eine Tieftemperatur-Version des hier betrachteten n -Vektor Modells, kann allgemein gezeigt werden (Diehl, 1985), daß

$$[m(x) - m_b] \sim x^{-(d-2)} \quad (5.21)$$

(5.20) ist konsistent mit diesem Ergebnis, das in $d=3$ auch durch Spinwellen-Rechnungen (Mills, 1971) bestätigt wird.

Die Skalenfunktion σ_{sp} für das Ordnungsparameterprofil am "speziellen" Übergang ist bei Diehl und Dietrich (1983) zu finden; sie lautet

$$\sigma_{sp}(x) = 1 + \frac{\epsilon}{6} [K_0(4x) - 3I(x) + \frac{\sqrt{3}\pi}{2} e^{-2x}] + O(\epsilon^2) \quad (5.22)$$

Für den in Fig. 5.1 und 5.2 gezeigten Vergleich der berechneten Profile (5.15) und (5.22) mit Monte-Carlo Ergebnissen von Binder und Landau (1984) in $d=3$ wird σ in der "exponentierten" Form

$$\sigma(x) = \sigma^{(0)} \exp(\epsilon \sigma^{(1)} / \sigma^{(0)}) \quad (5.23)$$

geschrieben und dann $\epsilon=1$ gesetzt. Die Darstellung (5.23) hat den Vorteil, daß sie für $x \rightarrow 0$ das Potenzgesetz (2.14) liefert (mit $O(\epsilon)$ -Werten für die Exponenten). In beiden Fällen liegt das 1-loop Profil näher am Monte-Carlo Ergebnis als das MF-Profil.

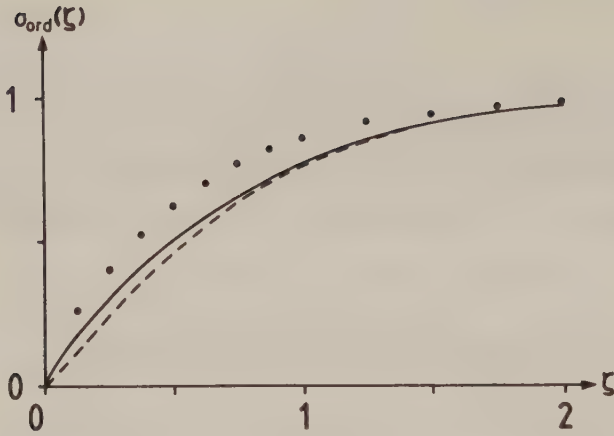


Fig. 5.1:Skalenfunktion des OP-Profiles am "gewöhnlichen" Übergang, in MF- (---) und 1-loop-Näherung (—). Die Punkte geben die MC-Ergebnisse an.

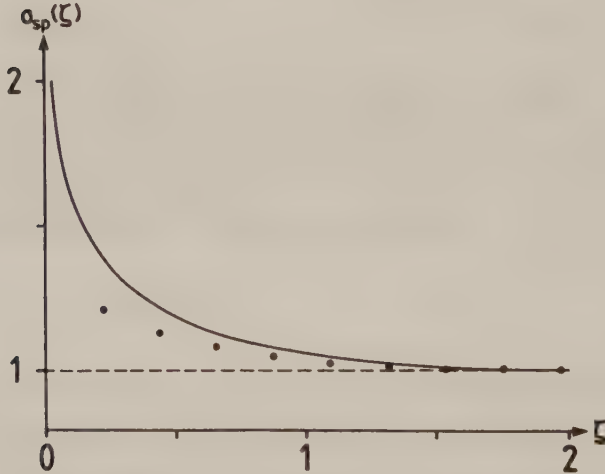


Fig. 5.2:Skalenfunktion des OP-Profiles am "speziellen" Übergang, in MF- (---) und 1-loop-Näherung (—). Die Punkte geben die MC-Ergebnisse an.

5.2 Der Überstruktur-Reflex am "gewöhnlichen" Übergang

Die Intensität (5.1) der Überstruktur-Reflexe läßt sich schreiben als

$$I_B = I_O |2\kappa\xi|^{2(1-\beta/\nu)} \left| \int_0^\infty dx e^{-2\kappa\xi \cdot x} \sigma(x) \right|^2 \quad (5.24a)$$

$$\text{mit } I_O = 4 \xi^2 m_b^2 |2\kappa\xi|^{-2(1-\beta/\nu)} ; \quad (5.24b)$$

sie ist eine Funktion der Temperatur und der Eindringtiefe (man beachte, daß I_O nicht temperaturabhängig ist). Die Laplace-Transformation in (5.24) muß im allgemeinen numerisch durchgeführt werden. Ist jedoch die Eindringtiefe z wesentlich größer als die Korrelationslänge ξ , dann besitzt I_B für $\kappa \in \mathbb{R}$ die einfache Form

$$I_B = 2 \frac{1}{\kappa} m_b \left[\frac{1}{2 \cdot \kappa} m_b + m_s + O(\kappa) \right] ; \quad (5.25)$$

obwohl die Temperaturabhängigkeit vom Volumenwert m_b dominiert wird, ist also in diesem Grenzfall die Messung der Überschuß-Magnetisierung m_s möglich. Man hat auf diese Weise die Möglichkeit zur experimentellen Bestimmung des Exponenten β_s von m_s sowie der universellen Amplitudenverhältnisse $m_{s,ord}^{(-)} / (m_b^{(-)} \xi_o^{(-)})$ und $m_{s,sp}^{(-)} / (m_b^{(-)} \xi_o^{(-)})$ ((5.25) ist auch am "speziellen" Übergang gültig). Die ϵ -Entwicklung liefert folgende Ergebnisse (Diehl et al., 1985) (siehe Fig. 5.3):

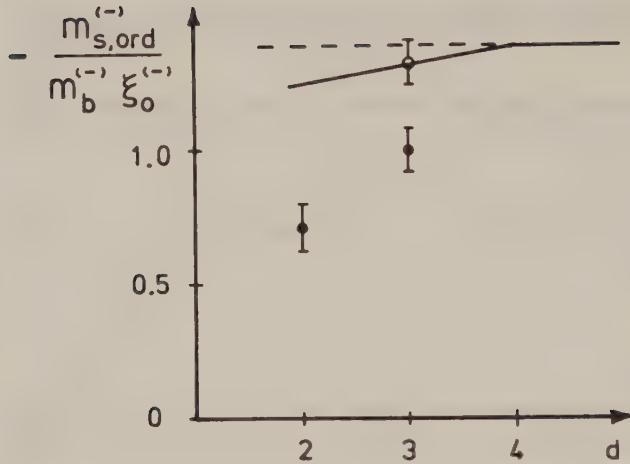


Fig. 5.3: Das universelle Amplitudenverhältnis $m_{s,ord}^{(-)} / (m_b^{(-)} \xi_0^{(-)})$ als Funktion der Raumdimension d . Die gerade Linie für $d \leq 4$ ist eine Extrapolation der ϵ -Entwicklung (5.26a). Die Punkte stellen die MC-Ergebnisse von Landau (1976a,b) (●) und Okabe et al. (1986) (○) dar (die Amplitude $\xi_0^{(-)}$ ist Tarko und Fisher (1975) entnommen).

$$m_{s,ord}^{(-)} / (m_b^{(-)} \xi_0^{(-)}) = -2 \ln 2 (1 - 0.05\epsilon) + O(\epsilon^2) \quad (5.26a)$$

$$m_{s,sp}^{(-)} / (m_b^{(-)} \xi_0^{(-)}) = \frac{\pi}{6} \epsilon + O(\epsilon^2) \quad (5.26b)$$

Ist umgekehrt z wesentlich kleiner als ξ , dann wird nur das Verhalten von $m(z)$ für kleine z beobachtet, so daß hier die Short-Distance Form (5.18) für $\sigma(z)$ eingesetzt werden kann; die Bragg-Intensität lautet dann

$$I_B = I_0 \tilde{C}_1^2 r^{2(1+(\beta_1-\beta)/\nu)} |2\kappa\xi|^{-2\beta_1/\nu} \cdot [1 - R_B(\kappa\xi)] \quad (5.27)$$

wobei $R_B(\kappa\xi)$ die Abweichungen von asymptotischem Verhalten für $t \rightarrow 0^-$ beschreibt :

$$R_B(\kappa\xi) = 2 \frac{\tilde{C}_2}{\tilde{C}_1} \frac{\Gamma(1+(\beta_1-\beta+1)/\nu)}{\Gamma(1+(\beta_1-\beta)/\nu)} |2\kappa\xi|^{-1/\nu} \cos\left[\frac{1}{\nu} \arccos \zeta\right] + \dots \quad (5.28)$$

Die Bragg-Intensität (5.27) verschwindet also bei Annäherung an den kritischen Punkt mit einem Potenzgesetz

$$I_B \sim |t|^{2\beta_1} \quad (5.29)$$

falls die Bedingung $\ell \ll \xi$ erfüllt ist. Da die Korrelationslänge für $t \rightarrow 0^-$ divergiert, ist diese Bedingung bei festgehaltener Eindringtiefe stets zu erfüllen; allerdings ist der Temperaturbereich, in dem (5.29) gültig ist, umso kleiner, je größer die Eindringtiefe ist.

Die Diskussion der diffusen Streuintensität in Kap. 4.3 hat gezeigt, daß es günstig ist, den führenden Korrekturterm zum Verschwinden zu bringen, um so einen großen kritischen Bereich zu erhalten. Aus (5.28) kann man sofort ablesen, daß dies hier durch die Wahl

$$\zeta = \zeta_B = \cos(\nu \cdot \frac{\pi}{2}) \quad (5.30)$$

erreicht wird.

Um die obere Grenze $t_{\max}^B$ des kritischen Bereichs (in dem I_B von β_1 dominiert wird) abzuschätzen, benützen wir wieder die Forderung

$$|R_B(\kappa\xi)| \leq \Delta \ll 1 \quad \text{für} \quad 0 < t < t_{\max}^B \quad (5.31)$$

Die Temperaturabhängigkeit von I_B/I_O , die man aus der numerischen Auswertung von (5.24) für das Profil (5.15) erhält, ist in Fig. 5.4 doppel-logarithmisch für $\zeta=\zeta_B$ aufgetragen. Man kann an dieser Kurve sehr schön den Crossover vom Oberflächenverhalten für $\xi \gg \ell$ mit der Steigung $2\beta_1$ zum Volumenverhalten für $\ell \gg \xi$ mit der Steigung 2β sehen. Die Funktion R_B ergibt sich aus I_B/I_O unmittelbar durch (5.27), sie ist in Fig. 5.5 gezeigt. Für $\Delta=0.1$ folgt daraus

$$\hat{t}_{\max}^B \approx 0.66 \quad (5.32)$$

und damit

$$t_{\max}^B = \hat{t}_{\max}^B \left[\frac{\xi_0}{\ell_0} \zeta_B^{-1} \sqrt{1-x_f^2} \right]^{1/\nu} \quad (5.33)$$

Einsetzen der Zahlenwerte aus Kap. 4.3 ergibt schließlich

$$t_{\max}^B = 1.4 \cdot 10^{-3} \quad (5.34)$$

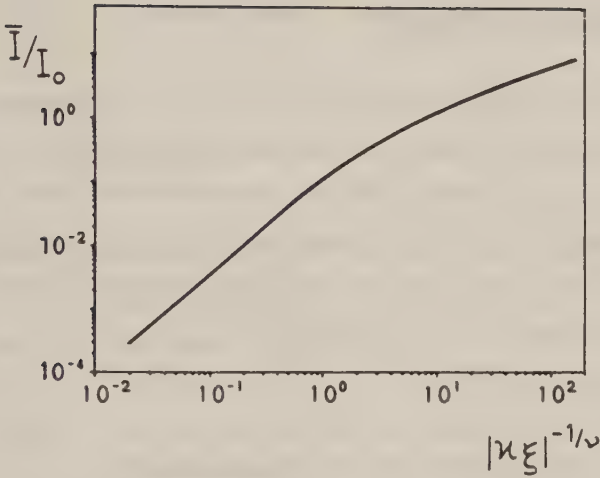


Fig. 5.4: Normierte Bragg-Intensität I_B/I_0 als Funktion der reduzierten Temperatur

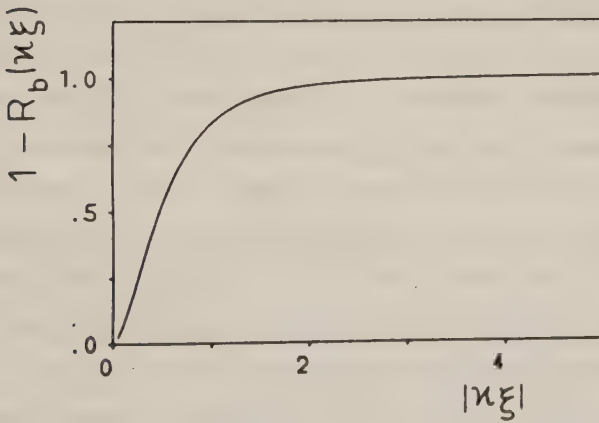


Fig. 5.5: Abweichung der Bragg-Intensität von der asymptotischen Form für $t \rightarrow 0^-$

6. Diskussion und Ausblick

Wir haben uns bisher ausschließlich auf die Untersuchung der statischen kritischen Phänomene mit Röntgenstreuung unter Totalreflexion beschränkt. Das ist aber nicht das einzige Gebiet, auf dem die Oberflächenstreuung wertvolle Informationen über das Oberflächenverhalten liefern kann. Daher sollen in diesem Kapitel einige dieser Fragestellungen kurz diskutiert werden.

6.1 Magnetische Streuung und kritische Dynamik

Die Streuung von Neutronen erlaubt es, außer binären Legierungen auch magnetische Systeme zu untersuchen. Damit vergrößert sich die Anzahl der beobachtbaren Universalitätsklassen beträchtlich. Darüber hinaus können im Prinzip mit Neutronen auch dynamische Oberflächeneffekte (Dietrich und Diehl, 1983) studiert werden. Der Zusammenhang zwischen Streuquerschnitt und Korrelationsfunktionen ist bei magnetischen Systemen erheblich komplizierter als bei binären Legierungen (Mazur und Mills, 1982; Dietrich und Wagner, 1985). Der Grund dafür ist Streuung der einfallenden Neutronen am langreichweitigen Dipolfeld der Elektronen, die bereits außerhalb der Probe stattfindet. Diese Beiträge werden jedoch in der Nähe des Überstruktureflexes von Antiferromagneten (oder des Bragg-Reflexes von Ferromagneten) vernachlässigbar klein. Die elastische Streuung liefert dort dasselbe Cusp-Verhalten wie bei binären Legierungen. Der kritische Beitrag zum

inelastischen Wirkungsquerschnitt lautet (Dietrich und Wagner, 1985)

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega d\omega} \sim \tilde{S}(p, \kappa, \kappa^*; t; \omega) \quad (6.1)$$

bei dem Energieübertrag $\hbar\omega$; $\tilde{S}$ ist die Verallgemeinerung von (3.33) für die zeitabhängige Zweipunkt-Korrelationsfunktion.

Für die weitere Diskussion beschränken wir uns auf Ising-Antiferromagneten; deren Dynamik wird durch ein zeitabhängiges Ginzburg-Landau Modell mit nicht-erhaltenem Ordnungsparameter beschrieben (Modell A). In diesem Fall besitzt $\tilde{S}$ die Skalenform

$$\tilde{S} = |\kappa|^{-3+n-z} \lambda^{-1} \Gamma(p/|\kappa|, p\xi, \zeta; \omega\lambda^{-1} \xi^z) \quad , \quad (6.2)$$

mit dem dynamischen kritischen (Volumen-)Exponenten z

$$\begin{aligned} z &= 2 - (1 - 6 \cdot \ln \frac{4}{3}) \eta + O(\epsilon^3) \\ &= 2.01 \quad (\text{Ising, } d=3) \end{aligned} \quad (6.3)$$

λ bezeichnet hier den Onsager-Koeffizienten, der die mikroskopische Zeitskala definiert.

Das asymptotische Verhalten von Γ folgt wieder aus der Short-Distance Entwicklung; am gewöhnlichen Übergang ergibt sich (Dietrich und Wagner, 1985)

$$r \sim \begin{cases} D_p (p \xi_o^+)^{z+\gamma_{11}/\nu} & t = \omega = 0, p \rightarrow 0 \\ D_t t^{-(\gamma_{11}+\nu z)} & p = \omega = 0, t \rightarrow 0^+ \\ D_\omega (\frac{\omega}{\omega_o})^{-(1+\gamma_{11}/z)} & p = t = 0, \omega \rightarrow 0 \end{cases} \quad (6.4)$$

Der inelastische magnetische Streuquerschnitt besitzt also am "gewöhnlichen" Übergang in diesem Fall im Gegensatz zur elastischen Streuung eine echte Divergenz bei $T=T_C$, $p=0$ und $\omega=0$.

Für die Berechnung der Skalenfunktion r benötigt man die Korrelations- und Response-Propagatoren $C_A^{(0)}$ und $R_A^{(0)}$. In der $pz\omega$ -Darstellung lauten diese (Dietrich und Diehl, 1983)

$$C_A^{(0)} = \frac{2}{\omega} \text{Im } \chi_A \quad (6.5)$$

$$R_A^{(0)} = \lambda_o^{-1} \chi_A \quad (6.6)$$

mit

$$\chi_A = \frac{1}{2b_\omega} \left[e^{-b_\omega |z-z'|} - \frac{c_o - b_\omega}{c_o + b_\omega} e^{-b_\omega (z+z')} \right] \quad (6.7)$$

und

$$b_\omega = (p^2 + \tau - i\omega/\lambda_o)^{1/2} \quad (6.8)$$

(λ_o ist der "nackte" Onsager-Koeffizient).

Die für die Berechnung der Korrelationsfunktion in der 1-loop Näherung benötigten Feynman-Graphen sind in Fig. 6.1 angegeben.

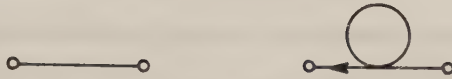


Fig. 6.1: Feynman-Graphen für die dynamische Korrelationsfunktion;

— bezeichnet den Korrelations-,
 — den Response-Propagator.

Ein Vergleich mit dem entsprechenden Ausdruck für die statische Korrelationsfunktion zeigt, daß wegen der gleichen Struktur der Propagatoren (4.1) und (6.7) die dynamische Korrelationsfunktion C_A aus der statischen direkt abgelesen werden kann; die einzigen Unterschiede sind

(i) In $G_R(p, \kappa, \kappa^*; t)$ muß p^2 durch $(p^2 - i\omega/\lambda)$ ersetzt werden. Das ist in der Skalenfunktion (4.82) so zu verstehen, daß man zuerst ψ in eine Form bringt, in der $\text{Re}(\cdot)$ nicht mehr explizit auftritt und erst dann die obige Ersetzung durchführt.

(ii) Aus dem so entstandenen $G_R^{(\lambda)}$ erhält man C_A mittels

$$C_A = \frac{2}{\omega} \text{Im } G_R^{(\lambda)} .$$

Das Ergebnis (4.82) für die statische Korrelationsfunktion kann also sofort auf die Dynamik übertragen werden.

6.2 Der Rauigkeitsübergang

Wir wenden uns nun einem ganz anderen Typ von Phasenübergang zu: Bei einer kritischen Temperatur T_R kann die Oberflächenstruktur eines Kristalls von einer "glatten" Tieftemperaturphase in eine "rauhe" Hochtemperaturphase übergehen (Burton et al., 1951). Dieser Rauigkeitsübergang[†] muß nicht bei allen Materialien auftreten, da die Schmelztemperatur des Kristalls unterhalb der (hypothetischen) Rauigkeitstemperatur T_R liegen kann. Experimentell wurde der Rauigkeitsübergang bisher nur beim ^4He (Kristall im Gleichgewicht mit der suprafluiden Phase) zweifelsfrei beobachtet (Avron et al., 1980). Der Übergang zeigt sich hierbei in einer Änderung der Gleichgewichtsform der Kristalle sowie in einer Änderung der Wachstumskinetik; diese können quantitativ mit theoretischen Vorhersagen (Andreev, 1982; Jakaprakash et al., 1983) verglichen werden (Balibar et al., 1984; Balibar et al., 1985). Die Streuung von Atomstrahlen an gestuften Metalloberflächen liefert Hinweise, daß bei diesen Systemen ebenfalls ein Rauigkeitsübergang auftreten kann (den Nijs et al., 1985; Villain et al., 1985; Selke und Szpilka, 1986). Es war bisher jedoch nicht möglich, viele theoretischen Vorhersagen für diesen kritischen Phasenübergang experimentell zu überprüfen, beispielsweise die Divergenz der Interfacebreite L (Weeks, 1980)

[†] Einen Überblick geben Weeks (1980) und Rottman und Wortis (1984).

$$L \sim |t_R|^{-1/4} \quad \text{für} \quad t_R = \frac{T_R - T}{T_R} \rightarrow 0^+ \quad . \quad (6.9)$$

Hier kann wieder die Röntgen- und Neutronenstreuung wertvolle Informationen liefern.

Das Standardmodell zur Beschreibung des Rauigkeitsübergangs ist das Solid-on-Solid (SOS) Modell, bei dem die Abweichung der Interface-Position von ihrem Mittelwert (bei $z=0$) durch eine eindeutige Funktion $h(\underline{r})$ beschrieben wird (siehe Fig. 6.2). $h(\underline{r})$ nimmt dabei gemessen in Einheiten der Gitterkonstanten a nur ganzzahlige Werte

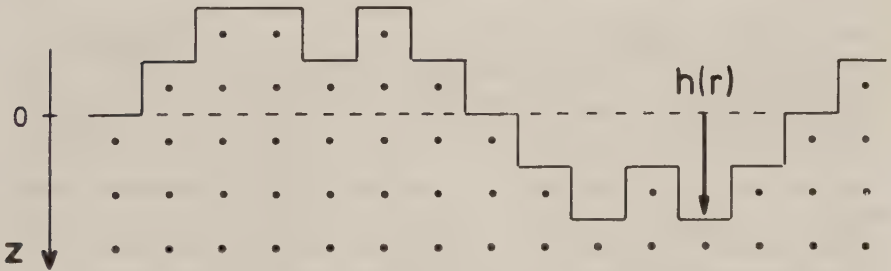


Fig. 6.2: Das Solid-on-Solid Modell einer Kristalloberfläche

an ! Für die Röntgenstreuung unter Totalreflexion an einer solchen rauhen Oberfläche haben wir in Kap.3 die Streuwelle berechnet (vergl.(3.18), (3.34) und (3.35)). Das Ergebnis kann in folgender Form zusammengefasst werden:

$$E_{\alpha}^S(R) = - r_e \frac{e^{iKR}}{R} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{R}_{\alpha} \hat{R}_{\beta}) E \quad (6.10)$$

$$\int E_{\beta\gamma}^f(z') \tilde{\rho}(\underline{R}') E_{\gamma\nu}^i(z') e_{\nu} e^{i\underline{k}\underline{r}'} d^3R'$$

mit

$$\underline{E}(z) = \begin{array}{ll} \underline{1} \exp(ik_{\perp}z) + \underline{R} \exp(-ik_{\perp}z) & ; \quad z < 0 \\ \underline{T} \exp(ik_{\perp}'z) & ; \quad z > 0 \end{array} \quad (6.11)$$

Dabei sind in $\underline{E}^i$ (bzw. $\underline{E}^f$) für die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten sowie für die Wellenzahlen $k_{\perp}$ und $k_{\perp}'$ jeweils diejenigen der einfallenden (bzw. der gestreuten) Welle einzusetzen (vergl. (3.11)).

Im Unterschied zu (3.18) ist $\tilde{\rho}(\underline{R})$ hier auch im Außenraum $z < 0$ von Null verschieden. Die Berechnung des Streuquerschnitts für die Streuwelle (6.10) ergibt einen sehr komplizierten Ausdruck, der vor allem den Nachteil hat, daß die Fluktuationen der Interfaceposition für $z > 0$ bzw. $z < 0$ unterschiedliche Beiträge liefern. Dementsprechend hat man Schwierigkeiten bei den Konfigurationsmittelwerten.

Voraussetzung dafür, daß (6.10) die Oberflächenstreuung vernünftig beschreibt, ist die Gültigkeit der DWBA. Bei einer rauen Oberfläche ist die Aufspaltung (3.4), (3.5) der Dielektrizitätskonstanten mit Sicherheit gerechtfertigt, wenn für die einlaufende bzw. die auslaufende Welle gilt

(i) $\alpha \gg \alpha_c$:

Die Beugung an der Grenzfläche braucht nicht berücksichtigt zu werden, d.h.

$$\begin{aligned}\underline{E} &\equiv \underline{1} \exp(ik_{\perp}z) \\ &= \underline{T} \exp(ik_{\perp}'z)\end{aligned}\quad (6.12)$$

oder

(ii) $k_{\perp} a \sqrt{\langle h^2 \rangle} \ll 1$ und $|k_{\perp}'| a \sqrt{\langle h^2 \rangle} \ll 1$:

Dies ist wegen $k_{\perp} = K \cdot \sin \alpha$ als eine Einschränkung an den Winkel α zu interpretieren. Eine raue Oberfläche kann in führender Näherung "glatt" aussehen, wenn man sie unter genügend kleinem Winkel betrachtet.

In dem Bereich, in dem $\tilde{\rho}$ von Null verschieden ist, können die Exponentialfunktionen in (6.11) entwickelt werden. Man hat außerdem die Relation

$$R_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha\beta} = T_{\alpha\beta} + (n^2 - 1) \delta_{\alpha z} \delta_{\beta z} T_{zz} \quad . \quad (6.13)$$

Da im Röntgenbereich der $(n^2 - 1)$ -Beitrag vernachlässigt werden kann, erhält man insgesamt

$$\underline{E} = \underline{T} + O(k_{\perp}z, k_{\perp}'z) \quad (6.14)$$

Einsetzen von (6.12) oder (6.14) für $\underline{E}^f$ und $\underline{E}^i$ in (6.10) ergibt Ausdrücke für die Streuwelle $\underline{E}^s$, die in der gemeinsamen Form

$$E_{\alpha}^s(\underline{R}) = -r_e \frac{e^{iKR}}{R} e_{\alpha}^{fi} E \int \gamma_{\rho}(\underline{R}') e^{i(\underline{k} \underline{r}' + \kappa z')} d^3R' \quad (6.15)$$

geschrieben werden können.

(6.15) bleibt auch gültig, wenn die Gitterstruktur des Materials mit berücksichtigt wird. Der differentielle Streuquerschnitt folgt dann wie in Kap.4 :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_e^2 | e_{\alpha}^{fi} F |^2 \Sigma_{SOS} \quad (6.16a)$$

$$\Sigma_{SOS} = \langle \sum_{m,n} e^{i(\underline{\Delta} \underline{R}_m - \underline{\Delta}^* \underline{R}_n)} \rangle_{SOS} \quad (6.16b)$$

wobei $\langle \dots \rangle_{SOS}$ den Mittelwert über die Interface-Konfigurationen bezeichnet (der Debye-Waller Faktor wurde wieder im Strukturfaktor F absorbiert). Schließlich wollen wir zu einer Schichtgeometrie (anstelle der halbunendlichen Geometrie) übergehen, wobei nach wie vor nur die Oberfläche bei $z=0$ rauh sein soll. Für diese Geometrie können beide Winkel $\alpha_i, \alpha_f \gg \alpha_c$ zugelassen werden. Ausgedrückt durch die Höhenvariablen $h(\underline{r})$ lautet (6.16) dann

$$\Sigma_{SOS} = \langle \sum_{\underline{r}_m, \underline{r}_n} e^{\frac{ik(\underline{r}_m - \underline{r}_n)}{}} \rangle \quad (6.17)$$

$$\sum_{\underline{z}_m = (h(\underline{r}_m) + 1/2)a}^{(N_3 - 1/2)a} e^{i\kappa z_m} \sum_{\underline{z}_n = (h(\underline{r}_n) + 1/2)a}^{(N_3 - 1/2)a} e^{-i\kappa^* z_n} \rangle_{SOS}$$

Die Berechnung der Gittersummen ist sehr einfach und ergibt

$$\Sigma_{\text{SOS}} = N_1 N_2 \frac{1}{4 \left| \sin \frac{\kappa a}{2} \right|^2} \sum_{\underline{r}} e^{i \underline{\kappa} \underline{r}} \quad (6.18)$$

$$< (e^{i \kappa a N_3} - e^{-i \kappa a h(\underline{r})}) (e^{-i \kappa^* a N_3} - e^{i \kappa^* a h(0)}) >_{\text{SOS}}$$

wobei N_1, N_2 und N_3 die Abmessungen des Kristalls in Einheiten der Gitterkonstante a bezeichnet.

Für die Diskussion des Streuquerschnitts (6.16), (6.18) beschränken wir uns auf den Fall der Totalreflexion mit $N_3 \cdot \text{Im}(\kappa a) \gg 1$ und $\sqrt{h^2} \cdot \text{Im}(\kappa a) \ll 1$

$$\Sigma_{\text{SOS}} = N_1 N_2 \frac{1}{4 \left| \sin \frac{\kappa a}{2} \right|^2} \sum_{\underline{r}} e^{i \underline{\kappa} \underline{r}} < e^{i \text{Re}(\kappa a) (h(\underline{r}) - h(0))} >_{\text{SOS}} \quad (6.19)$$

(1) $T > T_R$:

In der "rauen" Phase verhält sich die Höhenkorrelationsfunktion in Abhängigkeit vom Abstand r wie (Weeks, 1980)

$$< (h(\underline{r}) - h(0))^2 >_{\text{SOS}} = x_1(T) \ln(r/a) \quad (6.20)$$

mit dem temperaturabhängigen "Rauhigkeitsparameter" x_1 . Dies führt zu einem Potenzgesetz in der Streuintensität (6.19):

$$\Sigma_{\text{SOS}} \sim p^{-\left(2 - \frac{x_1}{2} \text{Re}^2(\tilde{\kappa} a)\right)}, \quad (6.21)$$

mit $\tilde{\kappa} = \text{Re}(\kappa) \pmod{2\pi/a} + i \cdot \text{Im}(\kappa)$.

wobei $p = k - q$ den Abstand von einem zweidimensionalen Vektor q des zweidimensionalen reziproken Gitters angibt. Die Breite von Σ_{SOS} in p -Richtung variiert also infolge der Interferenz zwischen den einzelnen Schichten periodisch als Funktion des "senkrechten" Impulsübertrags $\text{Re}(\kappa)$ (den Nijs et al., 1985).

(2) $T < T_R$:

Unterhalb von T_R ist der diffuse Anteil Σ_{diff} zu Σ_{SOS} besonders interessant. Speziell für $\text{Re}(\kappa a) \approx 2\pi n$ mit $n=0,1,\dots$

(man beachte, daß $\text{Im}(\kappa a) \ll 1$) vereinfacht sich (6.19) zu

$$\Sigma_{\text{diff}} = N_1 N_2 \left(\frac{\text{Re}(\tilde{\kappa})}{|\tilde{\kappa}|} \right)^2 \int_{\underline{r}} e^{i\kappa \underline{r}} \langle h(\underline{r}) h(0) \rangle_{\text{SOS}} \quad (6.22)$$

Die Streuintensität liefert also einen direkten Zugang zur Fouriertransformierten der Höhen-Höhen-Korrelationsfunktion; für $T > T_R$ findet man theoretisch

$$\Sigma_{\text{diff}} \sim (p^2 + \xi^{-2})^{-1} \quad (6.23)$$

Insbesondere erhält man daraus

i) direkt die Korrelationslänge ξ ,

und bei Integration über die Brillouin-Zone in der $\underline{k}$ -Ebene

ii) die Interfacebreite $L = \sqrt{\langle h^2 \rangle}$.

Da L mit ξ durch die Relation $L^2 \sim \ln(\xi)$ verknüpft ist, kann ξ also auch noch bestimmt werden, wenn es für die direkte Messung zu stark angewachsen ist.

Der Vorteil einer Messung der Oberflächenrauigkeit unter den Bedingungen der Totalreflexion liegt in der Unterdrückung von Volumenanteilen im Streuquerschnitt, die die Signale von der Oberfläche überdecken würden. Die hauptsächlichen Volumenbeiträge sind hierbei die thermisch diffuse Streuung und die Defektstreuung (Ausnahme : Kleinwinkelstreuung).

6.3. Oberflächenschmelzen

Ein weiterer interessanter Phasenübergang, der die Struktur von Kristalloberflächen betrifft, ist das Oberflächenschmelzen. Vor kurzem mit Ionen-Streuung an Blei-Oberflächen durchgeführte Experimente (Frenken und van der Veen, 1985) zeigen, daß sich an der Oberfläche eines Kristalls bereits weit unterhalb der Schmelztemperatur T_m eine "ungeordnete" Schicht bilden kann. Die Dicke $\hat{l}$ dieser Schicht divergiert bei Annäherung an den Schmelzpunkt; die experimentellen Daten sind konsistent mit

$$\hat{l} = \hat{l}_0 \left| \ln t_m \right| \quad \text{für} \quad t_m = \frac{T_m - T}{T_m} \rightarrow 0^+ \quad (6.24)$$

Dieses Phänomen wird als Oberflächenschmelzen gedeutet. Molekular-Dynamik Rechnungen von Rosato et al. (1986) für Argon zeigen hingegen kein Oberflächenschmelzen, die Oberflächen-Unordnung wird vielmehr als Rauigkeitsübergang interpretiert. Diese beiden Ergebnisse müssen nicht in Widerspruch zueinander

sein, da es auch experimentelle Hinweise für einen Rauigkeitsübergang in Argon knapp unterhalb des Tripelpunktes gibt (Miranda et al., 1984), während die (hypothetische) Rauigkeitstemperatur von Blei weit oberhalb der Schmelztemperatur liegen sollte.

Das logarithmische Verhalten von $\hat{\ell}$ in (6.24) läßt sich theoretisch sehr einfach verstehen. Dazu betrachten wir die Oberflächen-Freie-Energie Ω_s als Funktion der Dicke h der Flüssigkeitsschicht. Den Gleichgewichtswert $h=\hat{\ell}$ bekommt man durch Minimierung von $\Omega_s(h)$. Nähert man sich dem Tripelpunkt entlang der Koexistenzlinie von Gas und Festkörper, dann hat Ω_s die folgende Form :

$$\Omega_s(h) = h(\Omega_{b,\ell} - \Omega_{b,s}) + (\gamma_{s\ell} + \gamma_{\ell g}) + V(h)(\gamma_{sg} - \gamma_{s\ell} - \gamma_{\ell g}) \quad (6.25)$$

mit $V(h) \rightarrow 0$ für $h \rightarrow \infty$ und $V(0)=1$.

Die einzelnen Beiträge zu Ω_s haben folgende physikalische Bedeutung :

- (i) Unterhalb der Schmelztemperatur T_m hat die metastabile flüssige Phase (liquid) eine höhere Volumen-Freie Energie $\Omega_{b,\ell}$ als Festkörper (solid) und Gas (Koexistenz von Festkörper und Gas bedeutet $\Omega_{b,s} = \Omega_{b,g}$). Der erste Term in (6.25) gibt daher an, wieviel Volumen-Freie Energie benötigt wird, um eine Flüssigkeitsschicht der Dicke h zu erzeugen. Dieser Beitrag verschwindet am Tripelpunkt.
- (ii) Die übrigen Terme geben die Freie Energie der Phasengrenz-

flächen an. Für $h \rightarrow \infty$ wechselwirken die beiden Grenzflächen nicht miteinander; dieser Anteil zur Freien Energie ist dann einfach die Summe der Oberflächenspannungen γ_{sl} und γ_{lg} der Fest-Flüssig- und der Flüssig-Gas-Grenzfläche. Für $h=0$ hingegen hat man nur die Fest-Gas-Grenzfläche mit der Oberflächenspannung γ_{sg} .

$\Delta\gamma = \gamma_{sg} - \gamma_{sl} - \gamma_{lg}$ bleibt am Tripelpunkt endlich.

Es gibt bisher keine theoretischen Arbeiten, die das Verhalten von $V(h)$ für $h \rightarrow \infty$ vorhersagen. Falls der für das Schmelzen relevante Anteil der interatomaren Wechselwirkung effektiv kurzreichweitig ist, dann hat $V(h)$ die Form[†]

$$V(h) = \exp(-h/\hat{\ell}_0) \text{ für } h \rightarrow \infty \quad . \quad (6.26)$$

In diesem Fall findet man im Gleichgewicht die Filmdicke

$$\hat{\ell} = \hat{\ell}_0 \ln \left[\frac{\hat{\ell}_0}{\Delta\gamma} (\Omega_{b,\ell} - \Omega_{b,s}) \right] \quad (6.27)$$

Da bei einem Phasenübergang 1.Ordnung der Unterschied in den Volumen-Freien-Energien linear in $(T-T_m)$ verschwindet für $T \rightarrow T_m$, folgt daraus unmittelbar (6.24). Die wesentliche Voraussetzung für die logarithmische Divergenz von $\hat{\ell}$ am Schmelzpunkt ist also

[†] Die Herleitung eines solchen effektiven Interface-Potentials bei Benetzungsübergängen mit kurzreichweitigen Kräften wird von Brezin et al. (1983) und Lipowsky et al. (1983) angegeben.

die kurze Reichweite der effektiven Wechselwirkung zwischen den beiden Phasengrenzflächen.

Durch die Ionenstreuung kann nicht geklärt werden, ob es sich bei der von Frenken und van der Veen gefundenen "ungeordneten" Schicht wirklich um eine "Flüssigkeit", oder um einen Kristall mit sehr großen Schwingungsamplituden der Oberflächenatome und mit einer hohen Konzentration von Leerstellen handelt, d.h. ob in der Oberflächenschicht noch langreichweitige Ordnung vorhanden ist. Die ideale Methode zur Beantwortung dieser Frage ist wieder die Röntgenstreuung.

Ein Maß für das Vorhandensein langreichweitiger Ordnung ist die Intensität der Bragg-Reflexe. Der Bragg-Anteil Σ_B zu Σ in (3.21), (3.22) lautet

$$\Sigma_B(\underline{\Delta}) = \left| \left\langle \int e^{i\underline{\Delta}\underline{R}} \tilde{\rho}(\underline{R}) d^3R \right\rangle \right|^2 \quad (6.28)$$

Da wir uns hier nur für Σ_B für $\underline{k} \neq 0$ interessieren, kann wieder $\tilde{\rho}$ durch ρ ersetzt werden. Die mittlere Elektronendichte $\langle \rho(\underline{r}, z) \rangle$ setzt sich aus den Beiträgen der einzelnen Schichten zusammen :

$$\langle \rho(\underline{r}, z) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{\rho}^{(n)}(\underline{r}, z - z_n) \quad , \quad (6.29)$$

wobei $\tilde{\rho}^{(n)}$ eine um $z = z_n = n \cdot d$ stark lokalisierte Funktion ist (d : Abstand der Gitterebenen). Außerdem ist $\tilde{\rho}^{(n)}$ parallel zur Oberfläche streng periodisch. Dies ergibt (vergl. (3.24))

$$\Sigma_B(\underline{\Delta}) = \mathcal{F}(2\pi)^2 \sum_{\underline{g}} \delta^{(2)}(\underline{k} - \underline{g}) \cdot \left| \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\kappa z_n} F^{(n)}(\underline{\Delta}) \right|^2 \quad (6.30)$$

wobei $F^{(n)}$ den (thermisch gemittelten) Formfaktor der Einheitszellen in der n -ten Schicht bezeichnet. Die Summation in (6.30) läuft über alle Vektoren $\underline{q}$ des zweidimensionalen reziproken Gitters.

Um weiterzukommen brauchen wir nun ein Modell für das Abschmelzen der Oberfläche. Die genaue Form von $F^{(n)}$ als Funktion von n (und der reduzierten Temperatur t_m) ist noch nicht bekannt; es kommen allerdings nur Funktionen vom Kink-Typ in Frage. Wir wollen daher als einfachste Näherung einen scharfen Kink bei $n=n_0$ betrachten :

$$F^{(n)}(\underline{\Delta}) = \bar{F}(\underline{\Delta}) \Theta_H(n-n_0) \quad (6.31)$$

Die Summation in (6.30) ist dann trivial und ergibt

$$I_B(\underline{\Delta}) = \mathcal{F}(2\pi) \sum_{\underline{q}} \delta^{(2)}(\underline{k}-\underline{q}) |\bar{F}(\underline{\Delta})|^2 \quad (6.32)$$

$$\frac{1}{2} (\cosh \frac{d}{\ell} - \cos(d \cdot \text{Re } \kappa))^{-1} \exp(-2 \frac{n_0 d}{\ell})$$

Die Abhängigkeit der Bragg-Intensität von der Dicke $\hat{\ell}$ der Flüssigkeitsschicht wird durch den Faktor $\exp(-2\hat{\ell}/\ell)$ bestimmt. Man findet also in diesem Fall eine Konkurrenz der beiden Längenskalen Schichtdicke und Eindringtiefe. Diese Amplitude der einfallenden Welle klingt (für $\alpha_i < \alpha_c$) bereits in der Flüssigkeitsschicht exponentiell ab, so daß nur noch der in den Kristall hineinreichende Schwanz zur Anregung der Bragg-gestreuten Welle vorhanden ist (siehe Fig. 6.3).

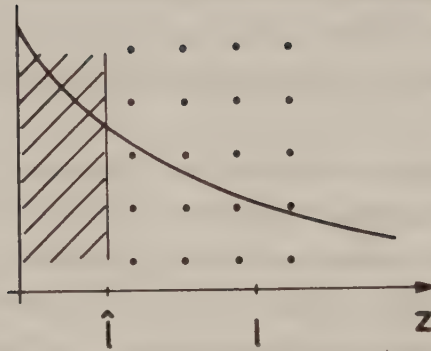


Fig 6.3: Anregung des Bragg-Reflexes beim Oberflächenschmelzen

Sollte sich die logarithmische Divergenz (6.24) von $\hat{l}$ bestätigen, dann ergibt (6.32) für die Bragg-Intensität die Temperaturabhängigkeit

$$\Sigma_B \sim t_m^{\beta_m} \quad (6.33)$$

mit dem geometrieabhängigen Exponenten

$$\beta_m : = 2 \hat{l}_0 / l \quad (6.34)$$

Die relativ schwache logarithmische Divergenz von $\hat{l}$ wird also durch die Oberflächenstreuung zu einem Potenzgesetz "verstärkt"; damit sollte eine wesentlich genauere Überprüfung der Temperaturabhängigkeit von $\hat{l}$ möglich sein als bisher.

Die mit den obigen Näherungen gewonnenen Ergebnisse werden bestätigt, wenn man die folgenden Verbesserungen durchführt :

- (i) In (6.30) können anstelle von (6.31) realistische Ordnungsparameterprofile eingesetzt werden. Diese ändern jedoch das asymptotische Temperaturverhalten (6.33) nicht, sondern ergeben Korrekturterme dazu.
- (ii) Für das scharfe Kink-Profil (6.31) kann die Braggstreuung im Rahmen der dynamischen Streutheorie exakt berechnet werden (2-Strahl-Fall) (Wagner, 1986; die dynamische Streutheorie für einen halbunendlichen Kristall wurde von Andreev (1985) untersucht). Es zeigt sich, daß die Temperaturabhängigkeit der Bragg-Intensität mit der in der DWBA gefundenen übereinstimmt, obwohl die Bragg-Reflexe im reziproken Raum eine ganz andere Struktur besitzen (die unterschiedliche Form der Bragg-Reflexe in der kinematischen und der dynamischen Streutheorie ist bereits aus dem Volumen bekannt (siehe z.B. Sears, 1978)).

7. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde gezeigt, daß die Streuung von Röntgenstrahlen und Neutronen unter Bedingungen der Totalreflexion aus theoretischer Sicht ein ideales Instrument zum Studium kooperativer Oberflächenphänomene darstellt.

Das oberflächennahe kritische Verhalten einer binären Legierung mit einem kontinuierlichen Ordnungs-Unordnungsübergang zeigt sich auf folgende Weise im Wirkungsquerschnitt :

1.1) Die diffuse Streuintensität besitzt am "gewöhnlichen"

Übergang in der Nähe von $p=0$, $t=0$ (bei festgehaltener Eindringtiefe) eine Cusp-Anomalie; das singuläre Verhalten in p - bzw. in der t -Richtung wird dabei durch Potenzgesetze mit den Oberflächenexponenten $(\eta_{\parallel}-1)$ bzw. γ_{11} beschrieben. Die reinen Potenzgesetze dominieren in einem Bereich, der durch das Anwachsen der Korrekturterme begrenzt wird. Die normierte Streuintensität $\hat{S}$ hat bei Berücksichtigung der wichtigsten Korrekturterme für $T=T_c$ die Form

$$\hat{S} = 1 + B_1 \left(\frac{p}{k} \right)^{\eta_{\parallel}-1} + B_2 \left(\frac{p}{k} \right)^2 + B_3 \left(\frac{p}{k} \right)^{\eta_{\parallel}+1} + \dots$$

Ebenso wurden die Korrekturterme für $p=0$, $t>0$ sowie für p fest, $t \rightarrow 0^+$ und $t>0$ fest, $p \rightarrow 0$ bestimmt. Die jeweiligen Amplituden sind (bei geeigneter Normierung) universell und wurden bis $O(\epsilon)$, teilweise bis $O(\epsilon^2)$ berechnet.

Die Kenntnis der Korrekturen zum asymptotischen kritischen

Verhalten ermöglicht die Abschätzung der oberen und unteren Grenzen des kritischen Bereichs. Die Amplitude des führenden Korrekturterms verschwindet an der oberen Grenze bei geeigneter Wahl von α_i und α_f . Eine solche Wahl ist für die experimentelle Bestimmung der Oberflächenexponenten optimal.

- 2) Für $T=T_C$ ist das Verhältnis der Amplituden der nicht-analytischen p -Potenzen $p^{\eta_{\parallel} \pm 1}$ in $\hat{S}$ durch die Konform-Invarianz der Korrelationen vollständig bestimmt.
 - 3) Das Verhältnis der Amplituden des t -Cusps für $T>T_C$ und $T<T_C$ ist identisch mit dem universellen Amplitudenverhältnis $\chi_{11}^{(+)} / \chi_{11}^{(-)}$.
 - 4) Die diffuse Streuintensität besitzt am "speziellen" Übergang eine echte Divergenz bei $p=0$, $t=0$. Das Maximum der Intensität als Funktion der Temperatur liegt bei festem p oberhalb T_C .
 - 5) Die Abweichung vom Volumenverhalten bei großer Eindringtiefe (im Vergleich zur Korrelationslänge) liefert die Überschußsuszeptibilität χ_s . Man hat auf diese Weise experimentell Zugang zum Oberflächenexponenten γ_s sowie zu den universellen Amplitudenverhältnissen $\chi_s^{(+)} / \chi_s^{(-)}$ und $\chi_s^{(\pm)} / (\chi_b^{(\pm)} \xi_o^{(\pm)})$.
- 2.1) Die Intensität der Überstrukturreflexe verschwindet für $t \rightarrow 0^-$ (bei festgehaltener Eindringtiefe) mit dem Potenzgesetz $|t|^{2\beta_1}$. Die zugehörige Amplitude ist (bei geeigneter Normierung) universell; sie wurde bis $O(\epsilon)$ berechnet. Der führende Korrekturterm hat die Form $|t|^{2\beta_1+1}$; seine Amplitude verschwindet ebenfalls bei geeigneter Wahl von α_i und α_f .

- 2) Bei großer Eindringtiefe ist die Abweichung vom Volumenverhalten proportional zur Überschußmagnetisierung m_s . Dies erlaubt die Bestimmung des Oberflächenexponenten β_s und des universellen Amplitudenverhältnisses $m_s^{(-)} / (m_b^{(-)} \xi_o^{(-)})$.

Für die Untersuchung des Rauigkeitsübergangs mittels der Röntgenstreuung unter Totalreflexion wurden folgende Ergebnisse erzielt :

- (i) Die Streuintensität oberhalb T_R wird vom Potenzgesetz $p^{-2+\eta_R}$ beschrieben; der Exponent η_R ist eine periodische Funktion des Impulsübertrags senkrecht zur Oberfläche.
- (ii) Die Winkelabhängigkeit der Streuintensität unterhalb T_R ermöglicht die Bestimmung der Korrelationslänge und der Interfacebreite.

Beim Oberflächenschmelzen kann mit der Röntgenstreuung das Verschwinden der langreichweitigen kristallinen Ordnung an der Oberfläche untersucht werden. Die Bragg-Intensität verschwindet bei Annäherung an die Schmelztemperatur mit einem Potenzgesetz, dessen Exponent von der Streugeometrie abhängt.

Anhang:

$\underline{K} = K(\cos\alpha \cos\varphi, \cos\alpha \sin\varphi, \sin\alpha)$ sei der Wellenvektor einer ebenen Welle in kartesischen Koordinaten, ausgedrückt in Kugelkoordinaten. Die Matrix der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten lautet dann (Dietrich und Wagner, 1984):

$$\begin{aligned} R_{xx} &= R_x \cos^2\varphi + R_y \sin^2\varphi \\ R_{yy} &= R_x \sin^2\varphi + R_y \cos^2\varphi \\ R_{xy} &= R_{yx} = (R_x - R_y) \sin\varphi \cos\varphi, \end{aligned} \tag{A.1}$$

$$R_{zz} = R_z ; \quad R_{\alpha\beta} = 0 \quad \text{sonst.}$$

mit

$$\begin{aligned} R_x &= \frac{(n^2 - \cos^2\alpha)^{1/2} - n^2 \sin\alpha}{(n^2 - \cos^2\alpha)^{1/2} + n^2 \sin\alpha} = -R_z, \\ R_y &= \frac{\sin\alpha - (n^2 - \cos^2\alpha)^{1/2}}{\sin\alpha + (n^2 - \cos^2\alpha)^{1/2}} \end{aligned} \tag{A.2}$$

$T_{\alpha\beta}$ ergibt sich aus (A.1) durch Ersetzen von R durch T mit

$$T_x = \frac{2(n^2 - \cos^2\alpha)^{1/2}}{n^2 \sin\alpha + (n^2 - \cos^2\alpha)^{1/2}}$$

$$T_y = \frac{2\sin\alpha}{\sin\alpha + (n^2 - \cos\alpha)^{1/2}} \quad (\text{A.3})$$

$$T_z = \frac{2\sin\alpha}{n^2 \sin\alpha + (n^2 - \cos\alpha)^{1/2}}$$

Die Gleichungen (A.2) und (A.3) gelten für $\alpha > \alpha_c$. Für $\alpha < \alpha_c$ muß $(n^2 - \cos^2\alpha)^{1/2}$ durch $i(\cos^2\alpha - n^2)^{1/2}$ ersetzt werden.

Die Matricelemente der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten T' und R' in (3.15) erhält man aus (A.2) und (A.3) durch die Substitution

$$\begin{aligned} (n^2 - \cos^2\alpha)^{1/2} &+ \frac{1}{n} \sin\alpha \\ \sin\alpha &+ \frac{1}{n} (n^2 - \cos^2\alpha)^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

und durch Ersetzen derjenigen n , die als Vorfaktoren von $\sin\alpha$ auftreten, durch $1/n$.

Literaturverzeichnis

- Alvarado, S.F., Campagna, M. und Hopster, H. (1982), Phys.Rev. Lett. 48, 51.
- Amit, D.J. (1984), "Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena" (World Scientific)
- Anders, R. (1981), "Bestimmung des kritischen Exponenten η der Korrelationsfunktion sowie der Exponenten ν und γ von Nickel aus einem Neutronenstreuexperiment", Doktorarbeit der Universität München, unveröffentlicht.
- Anders, R. und Stierstadt, K. (1981), Sol.State Comm. 39, 185.
- Andreev, A.F. (1982), Sov.Phys. JETP 53, 1063.
- Andreev, A.V. (1985), Sov.Phys.Usp. 28, 70.
- Avron, J.E., Balfour, L.S., Kupper, C.G., Landau, J., Lipson, S.G. und Schulman, L.S. (1980), Phys.Rev.Lett. 45, 814.
- Balibar, S., Gallet, F. und Wolf, P.E. (1984), Physica 126B, 138.
- Balibar, S., Gallet, F., Rolley, E. und Wolf, P.E. (1985), in "Festkörperprobleme" (Advances in Solid State Physics), hrsg. von P. Grosse (Vieweg, Braunschweig), Vol.XXV, p.113.
- Belavin, A.A., Polyakov, A.M. und Zamolodchikov, A.,B. (1984), J.Stat.Phys. 34, 763.
- Binder, K. (1983), in "Phase Transitions and Critical Phenomena", hrsg. von C. Domb und J.L. Lebowitz (Academic Press, New York), Vol. 8.
- Binder, K. und Landau, D.P. (1984), Phys.Rev.Lett. 52, 318.
- Brézin, E. und Leibler, S. (1983), Phys.Rev. B27, 594.
- Brèzin, E., LeGuillou, J.C. und Zinn-Justin, J. (1976), in

- "Phase Transitions and Critical Phenomena", hrsg. von
C. Domb und M.S. Green (Academic Press, New York), Vol. 6.
Brèzin, E., Halperin, B.I. und Leibler, S. (1983), J.Phys. (Paris)
44, 775.
- Burton, W.K., Cabrera, N. und Frank, F.C. (1951), Phil.Trans.
Roy.Soc.London 243A, 299.
- Cardy, J.L. (1984), Nucl.Phys. B240, [FS12], 514.
- Celotta, R.J., Pierce, D.T., Wang, G.C., Bader, S.D. und
Felcher, G.P. (1979), Phys.Rev.Lett. 43, 728.
- Debye, P. (1965), in "Critical Phenomena", hrsg. von M.S.Green und
J.V.Sengers.
- den Nijs, M., Riedel, E.K., Conrad, E.H. und Engel, T. (1985),
Phys.Rev.Lett. 55, 1689.
- Diehl, H.W. (1980), J.Appl.Phys. 53, 7914.
- Diehl, H.W. (1985), "Field-Theoretic Approach to Critical Behaviour
at Surfaces", in "Phase Transitions", hrsg. von C. Domb und
J.L. Lebowitz (Academic Press, New York), Vol.10 (erscheint
demnächst).
- Diehl, H.W. und Dietrich, S. (1980), Phys.Lett. 80A, 408.
- Diehl, H.W. und Dietrich, S. (1981a), Z.Phys. B42, 65.
- Diehl, H.W. und Dietrich, S. (1981b), Phys.Rev. B24, 2878.
- Diehl, H.W. und Dietrich, S. (1983), Z.Phys. B50, 117.
- Diehl, H.W. und Dietrich, S. (1985), in "Festkörperprobleme"
(Advances in Solid State Physics), hrsg. von P. Grosse
(Vieweg, Braunschweig), Vol.XXV, p.39.
- Diehl, H.W. und Eisenriegler, E. (1982), Phys.Rev.Lett. 48, 1767.
- Diehl, H.W. und Eisenriegler, E. (1984a), Phys.Rev. B30, 300.

- Diehl, H.W. und Eisenriegler, E. (1984b), in "Applications of Field Theory to Statistical Mechanics", Proc. of the VIII Sitges Conference, hrsg. von L. Garrido, Lecture Notes in Physics, (Springer, Berlin 1985), Vol.216, p. 343.
- Diehl, H.W., Dietrich, S. und Eisenriegler, E. (1983), Phys.Rev. B27, 2937.
- Diehl, H.W., Gompper, G. und Speth, W. (1985), Phys.Rev. B31, 5841.
- Dietrich, S. (1982), "Feldtheoretische Beschreibung kritischer Phänomene in halbbunendlichen Systemen", Doktorarbeit der Universität München, unveröffentlicht.
- Dietrich, S. (1986), J.Magn. & Magn. Mater. 54-57, 658.
- Dietrich, S. und Diehl, H.W. (1981), Z.Phys. B43, 315.
- Dietrich, S. und Diehl, H.W. (1983), Z.Phys. B51, 343.
- Dietrich, S. und Wagner, H. (1983), Phys.Rev.Lett. 51, 1469.
- Dietrich, S. und Wagner, H. (1984), Z.Phys. B56, 203.
- Dietrich, S. und Wagner, H. (1985), Z.Phys. B59, 35.
- Dosch, H., Batterman, B.W. und Wack, D.C. (1986), Phys.Rev.Lett. 56, 1144.
- Dotsenko, V.I. (1984), J.Stat.Phys. 34, 781.
- Eichner, S. (1984), "Temperaturabhängigkeit der Elektronenspinpolarisation an magnetischen Festkörperoberflächen", Doktorarbeit der Universität München, unveröffentlicht.
- Eisenberger, P. und Marra, W.C. (1981), Phys.Rev.Lett. 46, 1081.
- Feder, R. (1981), J.Phys. C14, 2049.
- Felcher, G.P. (1981), Phys.Rev. B24, 1595.
- Felcher, G.P., Kampwirth, R.T., Gray, K.E. und Felici, R. (1984), Phys.Rev.Lett. 52, 1539.

- Fisher, M.E. und Burford, R.J. (1967), Phys.Rev. 156, 583.
- Fisher, M.E. und Langer, J.S. (1968), Phys.Rev.Lett. 20, 665.
- Fisher, M.E. und Aharony, A. (1974), Phys.Rev. B10, 2818.
- Frenken, J.W.M. und van der Veen, J.F. (1985), Phys.Rev.Lett. 54, 134.
- Friedan, d., Qui, Z. und Shenker, H. (1984), Phys.Rev.Lett. 52, 1575.
- Friedan, d., Qui, Z. und Shenker, H. (1986), J. Magn. & Magn.Mater.
54-57, 655.
- Goldschmidt, Y.Y. (1983), Phys.Rev. B28, 4052.
- Goldschmidt, Y.Y. und Jasnow, D. (1984), Phys.Rev. B29, 3990.
- Gompper, G. (1984), Z.Phys. B56, 217.
- Gompper, G. (1986), Z.Phys. B62, 357.
- Gompper, G. und Wagner, H. (1985), Z.Phys. B59, 193.
- Ignatovich, V.K. (1975), Phys.stat.sol.(b) 71, 477.
- Jackson, J.D. (1962), "Classical Electrodynamics" (John Wiley & Sons, New York).
- Jakaprakash, C., Saam, W.F. und Teitel, S. (1983), Phys.Rev.
Lett. 50, 2017.
- Kikuchi, M. und Okabe, Y. (1985), Progr.Theor.Phys. 73, 32.
- Kirschner, J. (1984), Phys.Rev. B30, 415.
- Landau, D.P. (1976a), Phys.Rev. B13, 2997.
- Landau, D.P. (1976b), Phys.Rev. B14, 255.
- Le Guillou, J.C. und Zinn-Justin, J. (1985), J.Physique Lett.
46, L 137.
- Leibler, S. und Peliti, L. (1982), J.Phys. C30, L403.
- Lipowsky, R., Kroll, D.M. und Zia, R.K.P. (1983), Phys.Rev.
B27, 4499.
- Lu, B.C. und Rice, S. (1978), J.Chem.Phys. 68, 5558.

- Lubensky, T.C. und Rubin, M.H. (1975), Phys.Rev. B12, 3885.
- Marra, W.C., Eisenberger, P. und Cho, A.Y. (1979), J.Appl.Phys. 50, 6927.
- Marra, W.C., Fuoss, P.H., Eisenberger, P. (1982), Phys.Rev.Lett. 49, 1169.
- Mazur, P. und Mills, D.L. (1982), Phys.Rev. B26, 5175.
- McCoy, B.M. und Wu, T.T. (1967), Phys.Rev. 162, 436.
- Mills, D.L. (1971), Comm.Solid State Phys. 4, 28.
- Miranda, R., Albano, E.V., Daiser, S., Wandelt, K. und Ertl, G. (1984), J.Chem.Phys. 80, 2931.
- Nemirovsky, A.M. und Freed, K.F. (1985), Phys.Rev. B31, 3161.
- Nielsen, M. (1985), Z.Phys. B61, 415.
- Ohno, K. und Okabe, Y. (1983a), Phys.Lett. 95A, 41.
- Ohno, K. und Okabe, Y. (1983b), Progr.Theor.Phys. 70, 1226.
- Ohno, K. und Okabe, Y. (1983c), Phys.Lett. 99A, 54.
- Ohno, K. und Okabe, Y. (1985), J.Phys. A18, L557.
- Ohno, K., Okabe Y. und Morita, A. (1984), Progr.Theor.Phys. 71, 714.
- Ohno, K., Okabe, Y. und Abe, R. (1985), Phys.Lett. 107A, 41.
- Okabe, Y. und Ohno, K. (1984), Phys.Rev. B30, 6573.
- Okabe, Y., Kikuchi, M. und Ohno, K. (1986), Progr.Theor.Phys.,
erscheint demnächst
- Peliti, L. und Leibler, S. (1983), J.Phys. C16, 2635.
- Polyakov, A.M. (1970), Pisma Zh.Eksp.Teor.Fiz. 12, 538, [JETP
Lett. 12, 381].
- Rau, C. (1982), J.Magn. & Magn. Mater. 30, 141.
- Rau, C. und Eichner, S. (1981), Phys.Rev.Lett. 47, 939.
- Reeve, J.S. und Guttman, A.J. (1980), Phys.Rev.Lett. 45, 1581.

Rosato, V., Cicotti, G. und Pontikis, V. (1986), Phys.Rev.

B33, 1860.

Rottman, C. und Wortis, M. (1984), Phys.Rep. 103, 59.

Rudnick, J. und Jasnow, D. (1982), Phys.Rev.Lett. 48, 1059.

Schiff, L.I. (1968), "Quantum Mechanics" (McGraw-Hill, New York)

Sears, V.F. (1978), Can.J.Phys. 56, 1261.

Selke, W. und Szpilka, A.M. (1986), Z.Phys. B62, 381.

Steyerl, A. (1972), Z.Phys. 254, 169.

Tarko, H.B. und Fisher, M.E. (1975), Phys.Rev. B11, 1217.

Villain, J., Grepel, D.R. und Lapujoulade, J. (1985), J.Phys. F15,
809.

Vineyard, G. (1982), Phys.Rev. B26, 4146.

Wagner, H. (1984), in "Applications of Field Theory to Statistical
Mechanics", Proc. of the VIII Sitges Conference, hrsg. von
L. Garrido, Lecture Notes in Physics, (Springer, Berlin 1985),
Vol.216, p.59.

Wagner, H. (1986), unveröffentlicht.

Weeks, J.D. (1980), in "Ordering in Strongly Fluktuating Matter
Systems", hrsg. von T.Riste (Plenum Press, New York).

Wegner, F. (1976), in "Phase transitions and critical phenomena",
hrsg. von C. Domb und M.S. Green (Academic Press, London),
Vol. 6.

Weller, D., Alvarado, S.F., Gudat, W., Schröder, K. und Campagna, M.
(1985), Phys.Rev.Lett. 54, 1555.

Wilson, C.A. (1980), J.Phys. C13, 925.

Whittington, S.G., Torrie, G.M. und Guttman, A.J. (1979), J.Phys.
A12, 2449.

Ich danke Herrn Prof. Dr. Herbert Wagner für die Anregung zu dieser Arbeit, für viele hilfreiche Gespräche und für gute Zusammenarbeit. Mein besonderer Dank gilt auch Dr. H.W. Diehl, Dr. S. Dietrich und W. Speth für zahlreiche fruchtbare Diskussionen.

Lebenslauf

3.9.1956	geboren in Stuttgart
1963 - 1965	Besuch der Volksschule in Stuttgart
1965 - 1967	Besuch der Volksschule in München
1967 - 1976	Besuch des Max-Planck-Gymnasiums in München
25.6.1976	Abitur
1976 - 1977	Bundeswehr
1977 - 1983	Studium der Physik an der Ludwig-Maximilians-Universität in München
30.3.1979	Vordiplom
10.1.1983	Diplom
1983 - 1986	Doktorarbeit am Lehrstuhl Prof.H. Wagner, LMU
1.2.1983 - 31.12.1983	wissenschaftliche Hilfskraft
1.1.1984 - 28.2.1986	wissenschaftlicher Angestellter
1.3.1986 -	vollbeschäftigte wissenschaftliche Hilfskraft an der Ludwig-Maximilians-Universität München

